

Львівський національний університет імені Івана Франка  
Кафедра теоретичної фізики

Наукова конференція

# Нові напрямки у фізиці та астрофізиці

(присвячена 65-річчю проф. І. О. Вакарчука)



Ivan Franko National University of Lviv  
Department for Theoretical Physics

Scientific Conference

## New Trends in Physics and Astrophysics

(dedicated to Prof. I. O. Vakarchuk on the occasion of his 65th birthday)

Львів, 15–16 березня 2012 року / Lviv, 15-16 March 2012

## ПОРЯДОК ДЕННИЙ / SCHEDULE

15 березня 2012 року (четвер) / 15 March 2012 (Thursday)

(вул. Кирила і Мефодія, 8; Велика Фізична аудиторія)

09:00–10:00 — *Реєстрація учасників / Registration*

(вул. Кирила і Мефодія, 8; Велика Фізична аудиторія)

09:30–10:00 — *Відкриття / Opening*

### ПЛЕНАРНЕ ЗАСІДАННЯ / PLENARY SESSION

Веде *В. Ткачук*

10:00–10:30 — *I. Stasyuk*. Кореляційні ефекти в квантовому гратковому бозе-газі

10:30–11:00 — *O. Bakai*. Short-range order and critical fluctuations

11:00–11:30 — *A. Drzewiński*. Modeling of the polymer transport through biological membranes

**11:30–12:00 — перерва на каву / coffee break**

12:00–12:30 — *O. Держко*. Про один механізм виникнення феромагнетизму

12:30–13:00 — *Б. Новосядлий*. Фантомне скалярне поле як темна енергія, що прискорює розширення Всесвіту

**13:00–15:00 — перерва на обід / lunch**

### СЕКЦІЯ А / SECTION A

Веде *Б. Падляк*

15:00–15:30 — *T. Masłowski*. Modeling of the protonic conductivity by the kinetic Monte Carlo method

15:30–15:45 — *М. Ткач*. Властивості квазістаціонарних станів системи електронів, взаємодіючих з електромагнітним полем у резонансно-тунельних структурах

15:45–16:00 — *N. Korynevskii*. On the dipole glass parameter in the mixed ferro-antiferroelectric systems

16:00–16:30 — *A. Shvaika*. Many-body dynamics and x-ray spectroscopy of strongly correlated electron systems

### СЕКЦІЯ В / SECTION B

Веде *А. Трохимчук*

15:00–15:30 — *O. Chalyi*. Specific features of diffusion processes in nanoscale and bulk liquid systems

15:30–16:00 — *T. Bryk*. Unusual properties of liquid metals at high pressures

16:00–16:30 — *В. Пацаган*. Колективна динаміка рідких Ca і Mg

**Вечеря / Dinner**

**16 березня 2012 року (п'ятниця) / 16 March 2012 (Friday)**

(вул. Кирила і Мефодія, 8; Велика Фізична аудиторія)

**ПЛЕНАРНЕ ЗАСІДАННЯ / PLENARY SESSION**

**Веде А. Drzewiński**

10:00–10:30 — Ю. Головач. Сила степеневих законів / Power of the power laws

10:30–11:00 — Yu. Sytenko. Diffraction and the Aharonov-Bohm effect

11:00–11:30 — V. Cao Long. Stochastic processes in Quantum Optics

**11:30–12:00 — перерва на каву / coffee break**

12:00–12:30 — І. Мриггод. Складна динаміка простих плинів: прояви і моделі

12:30–13:00 — Ю. Калюжний. Розрахунок та дослідження фазової діаграми  
рідина-газ полідисперсної суміші дипольних

13:00–13:30 — В. Ткачук. Фізичні системи у просторі–часі з деформованою  
алгеброю Гайзенберга

**13:30–15:00 — перерва на обід / lunch**

**СЕКЦІЯ А / SECTION A**

**Веде Т. Брик**

15:00–15:30 — T. Patsahan. Fluids in disordered porous media: scaled particle  
theory

15:30–16:00 — A. Trokhymchuk. A novel concept for augmented van der Waals  
theory of liquid state

**СЕКЦІЯ В / SECTION B**

**Веде А. Дувіряк**

15:00–15:30 — М. Ваврух. Нові моделі у теорії вироджених карликів

15:30–16:00 — Yu. Yaremko. Self-action problem for a massless charged particle

**16:00–16:30 — перерва на каву / coffee break**

**СЕКЦІЯ А / SECTION A**

**Веде Т. Masłowski**

16:30–17:00 — R. Levitskii. Thermodynamics and relaxational dynamics of  
quasi-one-dimensional ferroelectric compounds

17:00–17:30 — B. Padlyak. Ferromagnetic resonance and static magnetic properties  
of the magnetic nanoparticles in porous glasses

17:30–17:45 — М. Кланчук. Електронні стани сферичної квантової точки  
в самоузгодженому потенціалі

**СЕКЦІЯ В / SECTION B**

**Веде Ю. Яремко**

16:30–17:00 — М. Стоділка. Діагностика хвильових процесів в фотосфері  
Сонця

17:00–17:15 — N. Virnina. VRI photometric study of near-contact binary W corvi

17:15–17:30 — A. Diviryak. Interquark interactions in a reformulated  
chromodynamics

18:00 — Презентація підручника: І. О. Вакарчук, “Квантова механіка”  
(4-е вид.); веде В. Ткачук.

# Short-range order and critical fluctuations

*O. Bakai*

National Science Center “Kharkov Institute of Physics and Technology”

Usually short-range order (SRO) is ignored or averaged out at consideration of critical phenomena because it is believed that SRO does not impact the criticality which is controlled by the long-range correlations. Meanwhile SRO is responsible for the small-scale dynamic and kinetic events. By a way it determines the system critical behavior.

In the presentation SRO effects in the vicinity of gas-liquid critical point are considered within the framework of a model of heterophase fluctuations.

## Unusual properties of liquid metals at high pressures

*T. Bryk,<sup>1</sup> F. Gorelli<sup>2,4</sup>, M. Santoro<sup>2,4</sup>, T. Scopigno<sup>3,4</sup>*

<sup>1</sup>Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,

<sup>2</sup>European Laboratory for Non Linear Spectroscopy, Sesto Fiorentino, Firenze, Italy

<sup>3</sup>Dipartimento di Fisica, Universita' di Roma “La Sapienza”, Italy

<sup>4</sup>IPCF-CNR, c/o Universita' di Roma “La Sapienza”, Italy

Simple alkali metals reveal interesting features of structural, electronic and dynamic properties connected with their rich phase diagrams at high pressures. Liquid alkali metals were studied much less experimentally and mainly *ab initio* computer simulations can shed light on connection between their structural, electronic and dynamic properties at high pressures. We report an *ab initio* molecular dynamics study of structural and dynamic properties of liquid Li and Rb along isothermal lines in wide pressure ranges: ambient-185GPa and 1.2GPa–33GPa, respectively.

The most interesting feature of liquid Li at high pressures is the metal-nonmetal transition that takes place when mainly electronic *p*-states form the ground state instead of *s*-electrons. We will discuss the pressure dependence of electronic density of states, pair and bond-angle correlation functions as well as spectra of collective excitations.

The most less-known phase diagram of alkali metals is for the case of Rb. Only the approximate location of the bcc-fcc-liquid triple point is more or less known. We analyze the structural properties of high-pressure liquid Rb via pair and bond-angle distribution functions, electronic properties via density of states and ion-electron structure factors, calculated from *ab initio* simulations. We show, that in the region of pressures 9–12 GPa the changes in structural, electronic and dynamic properties give evidence of a structural transformation in liquid Rb.

# Новий варіант колективного опису моделі сильнонеідеальної електронної рідини

*М. Ваврух, С. Смеречинський, Н. Тишко*

Кафедра астрофізики  
Львівського національного університету імені Івана Франка

Теорія холодних карликів була створена Чандрасекгаром у першій половині минулого століття.

Спостереження карликів космічними апаратами за останні два десятиліття виявили велике різноманіття властивостей цих об'єктів і створили можливість коректного опису їх внутрішньої будови. Ця задача вимагає створення більш реалістичних моделей і теоретичних розрахунків характеристик карликів на їх основі.

Нами запропоновано послідовність моделей [1,2], що узагальнюють стандартну модель Чандрасекгара в теорії вироджених карликів. Знайдено напіваналітичні розв'язки рівняння механічної рівноваги у базовій двопараметричній моделі холодних карликів, у якій фігурують параметр релятивізму в центрі зорі  $x_0$  і параметр усередненого хімічного складу  $\mu_e = \langle A/Z \rangle$ . Ця модель узагальнена на випадок неоднорідного хімічного складу вздовж радіуса зорі. Неповне виродження електронної підсистеми враховано у 4-параметричній моделі для опису низькотемпературних карликів, що враховує наявність ізотермічного ядра і містить додаткові параметри ( $R_c$  — радіус ядра,  $T_0$  — його температура). Залежність температури від координати у периферійній області моделюється. Використано розклади Зоммерфельда у рівнянні стану виродженого релятивістського ідеального електронного газу, у якому температурну поправку засереднено по об'єму зорі з ваговою функцією, рівною густині частинок. Одержане редуковане рівняння стану дозволяє звести рівняння механічної рівноваги у цій моделі до рівняння в моделі холодних карликів. При цьому радіус ізотермічного ядра вважається вільним параметром, близьким до радіуса карлика. Новий варіант 4-параметричної моделі пристосований до опису вироджених карликів із довільною температурою ядра (і світністю), зокрема для “гарячих” карликів, світність яких може еревищувати світність Сонця. Тут використано рівняння стану без застосування розкладів Зоммерфельда, а радіус ядра визначається строго, з умови рівності нулю хімічного потенціалу електронів. Розглянуто два варіанти опису периферійної області карлика. У першому з них наближено розв'язується система рівнянь внутрішньої структури сферичного шару, у другому периферійна область описується політропою типу Лена–Емдена.

У рамках цих моделей здійснено розрахунок елементів внутрішньої будови (розподіли густини, температури та хімічного складу вздовж радіуса) і характеристик карликів (маса, радіус, енергія). На основі даних про маси, радіуси та ефективні температури для вибірок (див. напр. [3]), що містять тисячі цих об'єктів спектрального класу DA, розв'язана обернена задача — знаходження параметрів моделей для спостережуваних карликів. На основі розрахунку залежності від параметрів моделі повної енергії (з врахуванням енергії спокою електронів) встановлено енергетичну залежність характеристик

карликів, що узгоджується зі спостережуваними розподілами карликів за масами (радіусами) і дає їх теоретичну інтерпретацію. Знайдено область існування вироджених карликів на площині параметрів  $x_0$ ,  $T_0$ . Результати розрахунку температури ізотермічного ядра співставлено з оцінками інших авторів, виконаних у рамках еволюційного підходу.

Уточнено область стійкості гіпотетичних карликів великих мас відносно ефектів загальної теорії відносності.

#### Література

- [1] М. В. Ваврух, С. В. Смеречинский, Н. Л. Тышко, Астрон. журн. **88**, № 6, 1 (2011).
- [2] М. В. Ваврух, С. В. Смеречинский, Астрон. журн. **89**, № 5, 1 (2012).
- [3] Р.-Е. Tremblay, P. Bergeron, A. Gianninas, Ap. J. **730**, 2 (2011).

## VRI photometric study of near-contact binary W corvi

*N. Virnina<sup>1</sup>, M. Radionova<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Odessa National Maritime University, Ukraine,

<sup>2</sup>Mariinskaya Grammar School, Odessa, Ukraine

The close binary system W Crv was recognized as one of the few binaries in or near physical contact, but far from thermal contact. This fact attracts the attention of many investigators since this star was classified as a close binary with short period, but at the same time with significant difference in depths of minima.

The depths of minima could be achieved not only by the difference between the temperatures of the components or the mass ratio, but also by the presence of spots. Thus, the spectral mass ratio is required for correct model. We applied the mass ratio  $q = 0.682 \pm 0.016$  determined by Rucinski and Lu in 2000 to our VRI photometric observations of this binary system, collected during 2011 on the telescope TOA–150 of Tzec Maun Observatory. On our phase curves a slight O'Connell effect is noticeable: the first maximum is brighter than the second one.

As has been demonstrated by observations since 1954, W Crv exhibits changing O'Connell effect, which is usually caused by spots. We computed several models with hot and cool spots using Wilson–Devinney code (Wilson 1993), which was deployed along with a Monte Carlo search procedure by Zola et al. (1997) to find the best solution. We found out that the most probable solutions contain either a cool spot on the hotter (first) component, or a hot spot on the colder one. Seasonal variability in asymmetry of the phase curves suggests that the spot (or more likely a group of spots) changes its position and probably temperature factor.

We also analysed the  $O-C$  diagram of this binary, which covers the period from 1935 till 2011. Our analysis confirmed that the period is increasing. The parabolic trend yields the period change of  $1.86 \cdot 10^{-8}$  days/year. Using the masses of the components determined by Rucinski and Lu in 2000 we calculated that this value of period change corresponds to  $\dot{M} = 3.42 \cdot 10^{-8} M_{\odot}/\text{year}$ .

# Сила степеневих законів – power of the power laws

Ю. Головач

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів

Степенеve загасання розподілу ймовірності  $P(x)$  певної випадкової вимірюваної величини  $x$ :

$$P(x) \sim x^{-\alpha} \quad (1)$$

спостерігається в багатьох природних і створених людиною системах. Приклади таких систем — численні, і вони становлять предмет вивчення як природничих так і суспільних наук. Відповідно, степеневий закон (1) відомий як закон Парето в економіці, процес Юля в біології, закон Зіпфа в кількісній лінгвістиці та демографії, закон Прайса в наукометрії, і, врешті-решт, як закон скейлінгу у більшості фундаментальних дисциплін [1].

Вже понад століття тривають дебати про причини частотої появи степеневих розподілів та про механізми їх генерації. Робляться спроби запропонувати підставові моделі виникнення таких розподілів і згрупувати різні явища, що описуються степеневими функціями (1) в окремі класи, на зразок класів універсальності в теорії критичних явищ [2].

Мета цієї доповіді, присвяченої 65-річчю мого Вчителя, проф. Івана Вакарчука — зробити короткий огляд проблеми виявлення та аналізу степеневих законів (1) для асимптотик розподілу ймовірності випадкових величин та проілюструвати дію цих законів на прикладі недавніх робіт в теорії фазових переходів [3], еконофізиці [4], наукометрії [5], теорії складних мереж [6].

## Література

- [1] M. Mitzenmacher, *Internet Mathematics* **1**, 226 (2003); M. E. J. Newman, *Contemp. Phys.* **46**, 232 (2005); D. Sornette, *Critical Phenomena in Natural Sciences* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006).
- [2] *Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory*, Yu. Holovatch (editor). World Scientific, Singapore, 2007, **V. 1** — 2004; **V. 2** — 2007; **V. 3** — under preparation.
- [3] C. von Ferber, R. Folk, Yu. Holovatch, R. Kenna, V. Palchykov, *Phys. Rev. E* **83**, 061114 (2011).
- [4] G. Oshanin, Yu. Holovatch, G. Schehr, *Physica A* **390**, 4340 (2011).
- [5] O. Mryglod, Yu. Holovatch, I. Mryglod, *Scientometrics* (2012), to appear (arXiv:1109.6211).
- [6] B. Berche, C. von Ferber, T. Holovatch, Yu. Holovatch, *Adv. Comp. Syst.* (2012), submitted (arXiv:1201.5532).

# Fluids in Disordered Porous Media: Scaled Particle Theory

*M. Holovko<sup>1</sup>, T. Patsahan<sup>1</sup>, V. Shmotolokha<sup>1</sup>, W. Dong<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Institute for Condensed Matter Physics, 1 Svientsitskii St., 79011, Lviv, Ukraine

<sup>2</sup>Ecole Normale Supérieure de Lyon, 46 Allée d'Italie, 69364 Lyon Cedex 07, France

In this report we review our recent results of the theoretical investigations of thermodynamic properties of fluids confined in random porous media. Three different types of porous media depicted by the corresponding models known in literature a hard sphere, overlapping hard sphere and sponge matrices are considered. We consider also the porous materials created by non-spherical matrix particles. The extension of the scaled particle theory (SPT) that allows us to obtain analytical expressions of both chemical potential and equation of state for a hard sphere fluid confined in considered random porous media are presented. The developed approach is based on a combination of the exact treatment of point scaled particle in the system of a hard sphere fluid confined in matrix and the thermodynamic consideration of a finite-size scaled particle. Based on such formulation of the SPT theory for a fluid in porous media a series of new analytical approximations were proposed. It is observed that some of them lead to highly accurate expressions for the fluid chemical potential over the whole density range with errors comparable to computer simulation results. In the one from such approximation the excess of chemical potential of fluid is presented in the form

$$\beta\mu_1^{\text{ex}} = -\ln\phi - \ln(1 - \eta_1/\phi^*) + (1+A)\frac{\eta_1/\phi_0}{1-\eta_1/\phi_0} + \frac{1}{2}(A+2B)\frac{(\eta_1/\phi_0)^2}{(1-\eta_1/\phi_0)^2} + \frac{2}{3}B\frac{(\eta_1/\phi_0)^3}{(1-\eta_1/\phi_0)^3} + \frac{\eta_1(\phi^* - \phi)}{\phi^*\phi(1-\eta_1/\phi^*)}$$

which includes three different types of porosities, namely the geometrical porosity  $\phi_0$ , the specific probe porosity  $\phi$  and the porosity  $\phi^*$  defined by the maximal packing fraction of fluid in porous media. In one-dimensional case  $\phi^* = \phi_0\phi/(\phi_0 - \phi)\ln(\phi_0/\phi)$ .  $\beta$  is the inverse temperature,  $\eta_1$  is the fluid packing fraction. The constants A and B depend from the type of porous materials.

The possibility of mapping of the thermodynamic properties of fluid in random porous media of different types are discussed using the obtained results. As is shown, the adsorption isotherms of fluid in the different matrices trend to be equivalent if porosities and specific surface pore areas of these matrices are identical. The results obtained in our study can be used as a reference systems for the description of more realistic models of fluid. As a example, we consider the extension of the van der Waals equation of state for a simple fluid in random porous media.

## References:

- [1] M. Holovko, W. Dong, J. Phys. Chem. B **133**, 6360 (2009).
- [2] T. Patsahan, M. Holovko, W. Dong, J. Chem. Phys. **134**, 074503 (2011).
- [3] M. Holovko, V. Shmotolokha, W. Dong, Cond. Matter Phys. **13**, 23607 (2010).
- [4] M. Holovko, T. Patsahan, W. Dong, Cond. Matter Phys. **15** (2012).



# Про один механізм виникнення феромагнетизму

*О. Держко*

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Розглядається стандартна модель Габбарда, в якій найнижча одноелектронна зона є бездисперсійною. Одноелектронні стани з цієї зони візуалізуються як локалізовані у малому фрагменті ґратки (пастці). За відсутності габбардівського одновузлового відштовхування ( $U = 0$ ) будь-який багатоелектронний стан, збудований з одноелектронних станів з бездисперсійної одноелектронної зони, є основним.

При “ввімкненні”  $U > 0$  виродження основного стану знімається лише частково: через принцип Паулі електрони залишаються в основному стані, навіть перебуваючи у пастках, що мають спільні вузли, *якщо* ці електрони є у симетричному спіновому стані (утворюють феромагнітний кластер). Якщо ж при цьому концентрація електронів на ґратці є достатньою для виникнення “гігантського” (феромагнітного) кластера, що містить ненульову фракцію всіх електронів, то стається перехід в феромагнітний (основний) стан.

Цей механізм виникнення феромагнетизму запропонували Андреас Мільке і Галь Тасакі двадцять років тому [1]. Однак, незважаючи на ряд спроб [2], досі немає експериментальної реалізації такої схеми появи феромагнетизму.

## Література

- [1] A. Mielke, J. Phys. A **24**, L73 (1991); **24**, 3311 (1991); **25**, 4335 (1992); Phys. Lett. A **174**, 443 (1993); H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **69**, 1608 (1992); A. Mielke, H. Tasaki, Commun. Math. Phys. **168**, 341 (1993).
- [2] R. Arita, K. Kuroki, H. Aoki, A. Yajima, M. Tsukada, Phys. Rev. B **57**, R6854 (1998); T. Kimura, H. Tamura, K. Shiraishi, H. Takayanagi, Phys. Rev. B **65**, 081307(R) (2002); H. Tamura, K. Shiraishi, T. Kimura, H. Takayanagi, Phys. Rev. B **65**, 085324 (2002); R. Arita, Y. Suwa, K. Kuroki, H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **88**, 127202 (2002); Z. Gulácsi, A. Kampf, D. Vollhardt, Phys. Rev. Lett. **105**, 266403 (2010).

## Modeling of the polymer transport through biological membranes

*A. Drzewiński*

Institute of Physics, University of Zielona Góra,  
ul. Prof. Z. Szafrana 4a, 65-516 Zielona Góra, Poland

Voltage-driven polymer translocation is studied by means of a stochastic lattice model. The model incorporates the voltage drop over the membrane as a bias in the hopping rate through the pore and exhibits the two main ingredients of the translocation process: the driven motion through the pore and the diffusive supply of chain length towards the pore on the cis-side and the drift away from the pore on the trans-side. The translocation time is either bias limited or diffusion limited. In the

bias-limited regime the translocation time is inverse proportional to the voltage drop over the membrane. In the diffusion-limited regime the translocation time is independent of the applied voltage, but it is rather sensitive to the motion rules of the model. We find that the whole regime is well described by a single curve determined by the initial slope and the saturation value. The dependence of these parameters on the length of the chain, the motion rules and the repton statistics are established. Repulsion of reptons as well as increase of chain length decrease the throughput of the polymer through the pore. As for free polymers, inclusion of a mechanism for hernia creations/annihilations leads to cross-over from Rouse-like behaviour to reptation. For the experimentally most relevant case (Rouse dynamics) the bimodal power-law dependence of the translocation time on the chain length is found.

### Література

- [1] D. Branton *et al.*, N. Biotechnol **26**, 1146 (2008).
- [2] J. M. J. van Leeuwen, A. Drzewiński, Phys. Rep. **475**, 53 (2009).
- [3] A. Bhattacharya, W. H. Morrison, K. Luo, T. Ala-Nissila, S.-C. Ying, A. Milchev, K. Binder, Eur. Phys. J E **29**, 423 (2009).
- [4] S. W. Kowalczyk, M. W. Tuijtel, S. P. Donkers, C. Dekker, Nano Letters **10**, 1414 (2010).
- [5] S. Zurek, A. Drzewiński, J. M. J. van Leeuwen, J. Stat. Mech. **2011**, P05006 (2011).
- [6] V. V. Lehtola, R. P. Linna, K. Kaski, EPL **85**, 58006 (2009); R. P. Linna, K. Kaski, arXiv:1112.5091 (2011).

## Interquark interactions in a reformulated chromodynamics

*J. W. Darewych<sup>1</sup>, A. Duviryak<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>York University (Toronto), <sup>2</sup>Institute for Condensed Matter Physics of NAS of Ukraine

We have found an approximate, iterative solution of the non-linear classical equations of motion of QCD with quark field source. This solution is used to reformulate the Lagrangian of QCD. We derive expressions for the interaction terms corresponding to the non-Abelian terms of the QCD action. In first iterative order, these turn out to be expressions involving convolutions of three and four one-gluon exchange Green functions, corresponding to three- and four-gluon interaction vertices.

We have examined these non-Abelian terms in the static, non-relativistic limit and found them to be a vector three- and a scalar four-point static potentials that depend on the inter point coordinates only. We express these potentials in terms of quadratures and calculate them explicitly for some restricted sections. An analysis indicates that both the potentials are Coulomb-like in general.

The derived three- and four-point cluster corrections together with the one-gluon exchange interaction could be used as a short-range contribution in potential models of baryons, tetra-quarks etc.

# Розрахунок та дослідження фазової діаграми рідина-газ полідисперсної суміші дипольних твердих сфер

*Ю. Калюжний*

Інститут фізики конденсованих систем, НАН України, м. Львів

На основі раніше запропонованого узагальнення термодинамічної теорії збурень для асоційованих рідин з центральним характером асоціативної взаємодії проведений розрахунок та аналіз фазової діаграми рідина-газ полідисперсної суміші дипольних твердих сфер. З метою моделювання особливостей фазової поведінки фероколоїдних дисперсій ми вважали, що дипольний момент кожної частинки є пропорційний кубу її діаметру. Ми представили повну фазову діаграму такої системи, яка включає криві “хмари” та “тіні”, бінодалі та функції розподілу співіснуючих фаз при різних ступенях полідисперсності системи.

## Електронні стани сферичної квантової точки в самоузгодженому потенціалі

*М. Клапчук, Г. Понеділок*

Національний університет “Львівська політехніка”

Розглядається задача про знаходження спектра та хвильових функцій електрона в сферичній квантовій точці. Електронейтральна квантова точка моделюється як система  $Z$  незваємодіючих електронів у сферично-симетричному додатному “желе”. Потенціальна енергія електрона у такій квантовій точці має вигляд

$$V_0(r) = \begin{cases} \frac{Z e^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2), & r \leq R \\ -\frac{\alpha}{r}, & r \geq R, \end{cases}$$

де  $R$  — радіус наносфери,  $V_0$ ,  $\alpha > 0$  — додатні константи. Обраний потенціал має ту перевагу, що дозволяє здійснювати неперервний перехід від його кулонівської частини до гармонічної змінюючи лише величину радіуса наносфери  $R$ .

Проведено оцінку енергії основного стану за теорією збурень у двох випадках: для точкової квантової точки, де нульовим наближенням вважається розв'язок водневої задачі та для безмежно протяжного осциляторного потенціалу, де збуренням вважається різниця між кулонівським та осциляторним потенціалом зовні наносфери. Модель досліджується також варіаційним методом.

Точнішим є розв'язок радіального рівняння Шредінгера способом зшивання хвильових функцій на межі наносфери. Отримане трансцендентне рівняння для спектра електронів, вирази для відповідних власних функцій через комбінації вироджених гіпергеометричних функцій. Власні значення енергії знаходяться чисельним розв'язком цих рівнянь.

Досліджено залежність спектра одноелектронної задачі від ефективного розміру квантової точки та інших параметрів модельного потенціалу. Для дослідження збуджених станів побудовано радіальну густину розподілу імовірності положення електрона в стаціонарних станах  $(n, l)$ . Показано, що при збільшенні радіуса наносфери, розміри електронної хмари збільшуються, тоді як енергія основного та збуджених станів зменшується. Також показано, що вплив розмірів та форми наносфери особливо сильно позначається на положенні енергетичних рівнів при зростанні  $Z$ . Ці параметри потенціалу можуть слугувати керуючими параметрами для оптимізації енергетичної структури сферичної квантової точки з метою отримання реальних структур із наперед заданими фізико-хімічними властивостями.

## Stochastic processes in Quantum Optics

*Cao Long Van, Doan Quoc Khoa, Nguyen Thanh Vinh*

**Institute of Physics, University of Zielona Góra**

A typical problem of Quantum Optics is the resonance interaction of several lasers with an atomic (molecular) system, where laser lights are fluctuating in amplitude and phase, and collisions between the elements of the system are frequently taken into account. Because of the very complicated (or even obscure) microscopic nature of all relevant relaxation mechanisms, they are modelled by classical time-dependent random processes. Thus, the dynamical equations describing the problem become stochastic differential equations. Except in certain specific cases, as in the case of the **chaotic white noise**, these equations cannot be solved in finite terms. When the coherence time of the noise (laser light or collisions) is comparable to the intrinsic time scale of the atomic system, obtaining an exact solution of such stochastic equations is very difficult. One of the most useful stochastic models has been proposed by Wódkiewicz and co-workers [1–4] and is based on the so-called pre-Gaussian process. It is composed of a finite number of independent two-step random telegraph signals. The strength of the pre-Gaussian formalism derives from the exact solubility of wide classes of stochastic equations. Even in the case of one random telegraph signal one can obtain several interesting results concerning various phenomena in Quantum Optics. In our talk we would like to present some of them.

### References

- [1] K. Wódkiewicz, B. W. Shore, J. H. Eberly, J. Opt. Soc. Am. B **1**, 398 (1984).
- [2] K. Wódkiewicz, B. W. Shore, J. H. Eberly, Phys. Rev. A **30**, 2390 (1984).
- [3] J. H. Eberly, K. Wódkiewicz, B. W. Shore, Phys. Rev. A **30**, 2381 (1984).
- [4] Cao Long Van, K. Wódkiewicz, J. Phys. B **19**, 1925 (1986).

# On the dipole glass parameter in the mixed ferro-antiferroelectric systems

*N. A. Korynevskii<sup>a,b,c</sup>, V. B. Solovyan<sup>a</sup>*

<sup>a</sup>Institute for Condensed Matter Physics, Natl. Acad. Sci. Ukraine,

<sup>b</sup>National University “Lviv Polytechnic”,

<sup>c</sup>Institute of Physics, University of Szczecin, Poland

The problem of microscopic origin of dipole glass parameter in mixed ferroelectric-antiferroelectric compounds is now intensively studied. Due to numerous experimental investigations [1–3] it was founded that fragments of dipole glass state in mixed ferroelectric-antiferroelectric hydrogen bonded crystals appears at rather high ( $\sim 100\text{K}$ ) temperature whereas usually this phase are observed at relatively low temperatures (below  $50\text{K}$ ). So, the idea of precursors of the dipole glass phase is now topical. Our theoretical approach is directed to found the microscopic mechanism of investigated phenomenon and to calculate a dipole glass parameter in a wide regions of temperature and concentration.

For dipole glass parameter calculation we use a pair correlation functions of nearest neighbours dipole particles. Applying the Edwards and Anderson replica method [4] to the Hamiltonian of mixed system with two binomial random variables (for  $z$ - and  $x$ -oriented dipole momenta in ferro-antiferroelectric mixture of  $\text{Rb}_n(\text{NH}_4)_{1-n}\text{H}_2\text{AsO}_4$  – type) in the quasi-spin representation, the free energy of the system has been obtained. On it's basis the single and pair correlation functions was calculated. The phase diagram of mixed system demonstrate the existence of pure ferroelectric and antiferroelectric phases, the mixtures of those phases with dipole-glass phase, as well the pure dipole-glass phase for intermediate concentration. The most interesting is the possibility to distinguish a precursors of dipole glass area where a slight dipole glass phase take place.

It was shown [5,6] that in investigated compounds at low temperatures and for intermediate concentration due to the system frustration long range ordering disappears and only short range correlations between nearest particles remains. Those correlations are characterized by a non-stochastic distribution. So, a corresponding state of mixed compound (the dipole-glass phase) must be interpreted as a set of non-uniform nearest neighbours arrangements with non-stochastic distributions for corresponding correlation functions. The dipole glass parameter is constructed on the base of those correlation functions and it takes into account the numerous solutions for them too.

## References

- [1] L. N. Korotkov, L. A. Shuvalov, Crystallography Reports **49**, 832 (2004).
- [2] E. Buixaderas, S. Kamba, J. Petzelt, Ferroelectrics **308**, 131 (2004).
- [3] Z. Trybula, J. Kaszynski, H. Maluszynska, Ferroelectrics **316**, 125 (2005).
- [4] S. F. Edwards, P. W. Anderson, J.Phys. E **5**, 965 (1975).
- [5] N. A. Korynevskii, .B. Solovyan, Phase Transitions **80**, 55 (2007).
- [6] N. A. Korynevskii, V. B. Solovyan, Physica B **405**, 2232 (2010).

# Термодинаміка і релаксаційна динаміка квазіодновимірних сегнетоактивних сполук з водневими зв'язками

*Р.Р.Левицький<sup>1</sup>, І.Р.Зачек<sup>2</sup>, А.С.Вдович<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів

<sup>2</sup>Національний університет "Львівська політехніка"

Запропоновано модифіковану модель протонного впорядкування квазіодновимірних сегнетоактивних сполук з водневими зв'язками з врахуванням лінійних за деформаціями  $\varepsilon_i$  та  $\varepsilon_5$  внесків в енергію протонної системи. На основі запропонованої моделі в наближенні двочастинкового кластера з врахуванням короткосяжних і далекосяжних взаємодій, поздовжнього електричного поля та гідростатичного тиску  $p = -\sigma_i$  розраховано термодинамічний потенціал, з умови мінімуму якого отримано систему рівнянь для деформацій  $\sigma_i$  і  $\sigma_5$  та параметру порядку. Використовуючи ці рівняння, розраховано поздовжню статичну діелектричну проникність механічно вільного і механічно затиснутого кристалу, коефіцієнти п'єзоелектричної напруги і деформації та пружну сталу при постійному полі. Молярну ентропію та теплоємність, обумовлену протонною системою, обчислено безпосередньо диференціюванням термодинамічного потенціалу за температурою.

В рамках методу нерівноважного статистичного оператора Д. М. Зубарева з врахуванням динаміки деформаційних процесів розраховано динамічні проникності механічно вільного і механічно затиснутого кристалу та часи релаксації.

Проведено ґрунтовний числовий аналіз залежності розрахованих характеристик від параметрів теорії та деформаційних параметрів. Знайдено оптимальні набори цих і затравочних параметрів для частково дейтерованих сегнетоелектриків, які дали можливість на належному рівні описати наявні для них експериментальні дані.

Досліджено вплив гідростатичного та одновісних тисків на фізичні характеристики частково дейтерованих кристалів. Отримано задовільний кількісний опис запропонованою теорією відповідних експериментальних даних.

Встановлено, що модифікація моделі квазіодномірних сегнетоелектриків практично не впливає на їх спонтанну поляризацію, теплоємність та поздовжню статичну діелектричну проникність, а приводить до появи п'єзоелектричних і пружних характеристик цих кристалів.

## Application of kinetic Monte Carlo simulation to protonic conductivity

*T. Masłowski<sup>1</sup>, A. Drzewiński<sup>1</sup>, J. Ulner<sup>2</sup>, J. Wojtkiewicz<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Physics, University of Zielona Góra,

<sup>2</sup>Institute of Low Temperature and Structure Research PAN, Wrocław, Poland

<sup>3</sup>Department of Mathematical Methods in Physics, University of Warsaw

The properties of protonic conductivity in acid crystals where quasi-free protons move inside the network of rotating tetrahedra are simulated with the help of the Kinetic Monte Carlo method applied to the model of 1-dim chain of rigid rods and 2-dim lattice of rigid squares. The two-step mechanism (the Grotthuss mechanism)

consisting of rotations of tetrahedra and of proton tunneling in Hydrogen bonds is assumed as the mechanism of charge diffusion. The Hydrogen bond is approximated by the double-Morse potential which parameters are used to calculate tunneling rates. The increase of the current with temperature and the saturation of the polarization with time is observed.

## **Складна динаміка простих плинів: прояви і моделі**

*I. М. Мриглод*

**Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів**

Рідкий стан є проміжним між кристалічним та газовим і виникає через встановлення своєрідного балансу між енергією та ентропією, між локальним впорядкуванням і тепловим рухом частинок. Відсутність макроскопічного структурного порядку і явного малого параметра у рідинах призводить до суттєвих ускладнень у статистичному описі таких систем, що пояснює, зокрема, те, чому на відміну від кристалів та газів, де основні теоретичні концепції були добре розвинуті вже всередині минулого століття, теорія рідин у той час почала лише формуватися, а реальний прогрес став можливим лише тоді, коли стали можливими експерименти із розсіяння, які забезпечили детальну інформацію про структуру, і важливе місце у фізиці почав відігравати комп'ютерний експеримент.

До рідин відносяться надзвичайно різнопланові об'єкти. З одного краю, це так звані прості рідини – багаточастинкові системи, у яких враховуються головно трансляційні ступені вільності. Далі йдуть молекулярні, магнітні та анізотропні рідини, у яких важливу роль відіграють також обертові та коливні рухи. І на іншому краю маємо складні рідини (чи м'яку речовину), для яких типовим є формування стійких асоціатів та існування мезоскопічних просторових і часових характерних масштабів, що робить їх опис надзвичайно складним як у теорії, так і в комп'ютерному експерименті. Водночас, уже навіть для найпростіших моделей рідини важливим є врахування тих процесів в їх динаміці, які типові для рідкого стану загалом, а саме ефектів ближнього порядку (чи іншими словами динамічної комірки), що проявляються у специфіці дифузійних процесів, появи еластичних властивостей на мезоскопічних масштабах, переносі тепла чи маси і виникненні праобразу фононних колективних рухів. Саме такі ефекти роблять динаміку простих рідин складною, а без їх врахування нерівнозначна теорія рідин не може вважатися довершеною.

Завдання цієї доповіді полягає, з одного боку, в представлення деяких основних ідей нерівнозначної статистичної теорії колективної динаміки рідин, що базується на формалізмі узагальнених колективних збуджень, і розвитку на цій основі простих динамічних моделей рідин, а з іншого – у демонстрації результатів використання цієї теорії, що отримані для найпростіших моделей рідин та сумішей і показують складність динаміки, яка властива рідинам.

# Фантомне скалярне поле як темна енергія, що прискорює розширення Всесвіту

*Б. Новосядлий, О. Сергієнко*

Астрономічна обсерваторія  
Львівського національного університету імені Івана Франка

Спостережувані дані про динаміку розширення Всесвіту, його великомасштабну структуру та кутовий спектр потужності флюктуацій температури реліктового випромінювання допускають існування фантомної темної енергії ( $w_{de} < -1$ ,  $p_{de} = w_{de}c^2\rho_{de}$ ) з домінантною середньою густиною  $\rho_{de} \approx (0.70 \pm 0.04)\rho_{tot}$ . Аналізуються можливості реалізації такого типу темної енергії у вигляді скалярного поля, яке майже однорідно заповнює Всесвіт та прискорює його розширення в сучасну епоху. Розглядається клас моделей фантомного поля, яке в ранню епоху еволюції Всесвіту за своїми динамічними властивостями було подібним до вакуумного поля ( $w_{de} = -1$ ) або космологічної сталої Айнштейна  $\Lambda$ . Не дивлячись на близькість властивостей такого фантомного скалярного поля до  $\Lambda$ -моделей в минулому, його динаміка у віддаленому майбутньому цілком відмінна: зростання густини такого поля за скінченний проміжок часу приводить до сингулярності типу Великий Розрив - руйнування структури матерії на всіх рівнях від скупчень галактик до атомів та їх ядер. Іншою відмінною особливістю космологічної моделі з таким полем є наявність горизонту подій, радіус якого прямує до нуля при наближенні до Великого Розриву. Оцінюються параметри космологічної моделі та фантомного скалярного поля на основі співставлення теоретичних розрахунків із спостережуваними даними методом Марківських ланцюжків Монте Карло, відтворюється потенціал поля та його еволюція при заданому лагранжіані скалярного поля. Обговорюються також проблеми інтерпретації таких полів в рамках сучасних фізичних теорій та моделей Дуже раннього Всесвіту.

## Ferromagnetic Resonance and Static Magnetic Properties of the Magnetic Nanoparticles in Porous Glasses

*B. V. Padlyak<sup>1,2</sup>, M. R. Dudek<sup>1</sup>, N. Gouskos<sup>3,4</sup>, Yu. K. Gorelenko<sup>5</sup>*

<sup>1</sup>Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland

<sup>2</sup>Sector of Spectroscopy, Institute of Physical Optics, Ukraine

<sup>3</sup>Solid State Section, Department of Physics, University of Athens, Greece

<sup>4</sup>Institute of Physics, West Pomeranian University of Technology, Szczecin, Poland

<sup>5</sup>Department of Chemistry, Ivan Franko National University

The experimental technique, equipment as well as theoretical background and possibilities of the ferromagnetic resonance (FMR) spectroscopy for study of the nanostructured magnetic materials are considered. The X-band FMR spectra of the Ni face-centered cubic (fcc) phase covered by carbon (Ni/C), the Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> oxide covered



by boric acid derivatives, the Ni-Al and Mg-Zn ferrites nanopowders and their parameters are presented and analyzed.

The X-band FMR spectra and static magnetic susceptibility of the Ni/C nanoparticles, embedded in diamagnetic matrix of the sodium borosilicate porous glasses have been investigated. The Ni/C nanoparticles with different average size were obtained through decomposition of ethylene on nanocrystalline Ni at 700°C according to [1]. Two glass samples (B and D types) were obtained from one sodium borosilicate glass with the 92 % SiO<sub>2</sub> – 7 % B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – 1 % Na<sub>2</sub>O basic composition according to special technology, described in [2]. The texture parameters of porous glasses of the B and D types were essentially different. Particularly, the average pore diameter was 45 and 320 nm in glasses of B and D types, respectively. The rectangular porous glass plates sized of 10×10×0.5 mm<sup>3</sup> were filled with Ni/C nanoparticles, which were introduced from the water suspension, according to technological conditions, developed by authors of this work.

The static magnetic susceptibility was measured by standard Faraday balance technique in the 80–1000 K temperature range. Pure porous glasses of both (B and D) types show diamagnetic susceptibility, which were independent of magnetic field and temperature. The same porous glasses with lower and higher concentration of the Ni/C nanoparticles show a linear dependence of static magnetic susceptibility on reciprocal values of the magnetic field that is an evidence of their superparamagnetic properties. Temperature dependence of the magnetic susceptibility for both samples is similar to the corresponding temperature dependence, characteristic for bulk Ni sample.

The X-band FMR spectra of the porous glasses, containing Ni/C nanoparticles consist of symmetrical signals centered at  $H_r = 3000(3)$  Gs (peak-to-peak derivative linewidth,  $\Delta H_{pp} = 615$  Gs) and  $H_r = 2978(3)$  Gs ( $\Delta H_{pp} = 721$  Gs) at  $T = 300$  K in samples with lower (glass of B type) and higher (glass of D type) Ni/C concentration, respectively. The observed FMR line intensities for both samples decreased with decreasing temperature and below  $T = 90$  K they disappear as a result of broadening processes. The position of ferromagnetic resonance line ( $H_r$ ), peak-to-peak derivative linewidth ( $\Delta H_{pp}$ ), and amplitude ( $A_{pp}$ ) as function of temperature for Ni/C nanoparticles in the matrix of porous glasses are investigated and analyzed.

A simple theoretical model, based on the Landau–Lifshits equation for magnetization of  $N$  magnetic nanoparticles, dispersed in a porous diamagnetic matrix [3], was used for explaining the observed features in the temperature dependencies of FMR spectra. The perspectives of future investigations by FMR technique of the magnetic nanoparticles, embedded in porous glasses and other porous media with well-defined size, shape and geometry of pores have been discussed.

## References

- [1] N. Guskos, M. Maryniak, J. Typek, P. Podsiadly, U. Narkiewicz, E. Senderek, Z. Rosłaniec, J. Non Cryst. Solids **355**, 1400 (2009).
- [2] E. Rysiakiewicz-Pasek, P. Lukaszewski, and J. Bogdanska, Opt. Appl. XXX, 173 (2000).
- [3] M.R. Dudek, N. Guskos, E. Senderek, Z. Rosłaniec, J. Alloys Comp. **504**, 289 (2010).

# **Diffraction and the Aharonov-Bohm effect**

*Yu. A. Sitenko, N. D. Vlasii*

**Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, Natl. Acad. Sci., Ukraine**

Quantum-mechanical scattering of nonrelativistic charged particles by a magnetic vortex of nonzero transverse size is considered. The limit of short, as compared to the vortex transverse size, wavelengths of a scattered particle corresponds to the quasiclassical limit, and, since the Aharonov–Bohm effect is the purely quantum effect that is alien to classical physics, its persistence in this limit seems to be hardly possible. Nevertheless, we show that the scattering Aharonov–Bohm effect does persist in the quasiclassical limit owing to the Fraunhofer diffraction persisting in the short-wavelength limit. Therefore, the flux of the vortex serves as a gate for the propagation of short-wavelength particles in the forward direction. The issue of the experimental detection of the Fraunhofer diffraction peak and the scattering Aharonov–Bohm effect is discussed.

## **Кореляційні ефекти у квантовому ґратковому бозе-газі**

*I. B. Стасюк*

**Інститут фізики конденсованих систем НАН України**

Протягом останніх років системи бозе-частинок з сильними локальними кореляціями є об'єктом інтенсивних теоретичних та експериментальних досліджень. До їх числа відносяться, зокрема, бозе-атоми у оптичних ґратках, де при надзвичайно низьких температурах відбувається фазовий перехід з появою бозе-конденсату. Модель Бозе–Хаббарда, запропонована для опису таких систем, знаходить застосування і в теорії явищ, пов'язаних з квантовою делокалізацією атомів водню, адсорбованих на поверхні металів, та поверхневою і об'ємною дифузією легких частинок, а також при вивченні термодинаміки інтеркаляції домішкових іонів у напівпровідникових структурах.

У доповіді дається огляд стану досліджень, що проводяться аналітичними і числовими методами в рамках моделі Бозе–Хаббарда та її узагальнень і присвячені розгляду термодинаміки фазових переходів і особливостей бозонного спектру при врахуванні ефектів неергодичності, появи впорядкувань типу хвиль густини, можливості зміни роду фазового переходу та фазового розшарування.

## **Діагностика хвильових процесів в фотосфері Сонця**

*М. Стоділка*

**Астрономічна обсерваторія  
Львівського національного університету імені Івана Франка**

У фотосфері Сонця серед різних типів коливань переважають акустико-гравітаційні хвилі, спектр яких охоплює хвилі, що поширюються, та еванесцентні хвилі. Верхня частина спектру представляє акустичні хвилі ( $p$ -моди),

внутрішні хвилі гравітації (ВХГ,  $g$ -моди) охоплюють нижню частину спектру акустико-гравітаційних хвиль.

Акустичні осциляції виявляють при дослідженні поля швидкостей, інтенсивності випромінювання, температури, тиску газу тощо. Правда, досі важко відповісти - що ж спостерігають в дійсності: чи еванесцентні залишки від фотосферних коливань, які збуджуються біля вершини конвективної зони, чи результат генерації акустичних коливань в конвективно стійкій області проникаючої конвекції, чи, можливо, ефект модуляції хвиль атмосферними неоднорідностями.

Хвилі гравітації можуть ефективно переносити механічний імпульс зоряної речовини, тому сама їх наявність призводить до більш однорідного обертання зорі; хвилі гравітації залучають для пояснення вмісту літію зір, що важливо для розуміння їх еволюції. ВХГ, які виникають в шарах під конвективною зоною, можуть нести інформацію про стан надр Сонця. Є сучасні дані, що хвилі гравітації переносять у верхні шари значно більше механічної енергії, ніж високочастотні акустичні хвилі, що вимагає перегляду ролі гідродинамічних хвиль при нагріванні сонячної хромосфери.

Для діагностики хвильових процесів в атмосфері Сонця ми використали вдосконалений нами інверсний підхід, що дає можливість, виходячи з спостережуваних даних, отримувати напівемпіричні моделі, а за ними дослідити фізичні умови і процеси, що відбуваються в атмосферах Сонця і зір.

За результатами спектральних спостережень з високим розділенням шляхом розв'язку оберненої задачі переносу випромінювання відтворена сітка моделей сонячної атмосфери та виділені акустичні хвилі та ВХГ. Проведено дослідження збудження, поширення, просторової структури хвиль та їх енергетики в умовах реальної атмосфери Сонця, отримані моделі  $p$ - та  $g$ -мод.

## **Властивості квазістаціонарних станів системи електронів, взаємодіючих з електромагнітним полем у резонансно-тунельних структурах**

*М. В. Ткач, Ю. О. Сеті*

**Кафедра теоретичної фізики,  
Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича**

Теорія транспорту електронів крізь резонансно-тунельні наноструктури розроблялася для систем, що знаходяться в слабкому електромагнітному полі. Однак зрозуміло, що в сильному полі транспортні властивості резонансно-тунельних структур можуть суттєво змінитися. Для розв'язання такої задачі потрібно знати відповідну хвильову функцію досить складної системи.

У пропонованій роботі розглядається симетрична двобар'ерна резонансно-тунельна структура (ДБРТС) в однорідному електромагнітному полі  $\epsilon(t) = 2\epsilon \cos \omega t$  довільної величини напруженості  $\epsilon$  електричної складової та частоти  $\omega$ . Вважається, що моноенергетичний потік електронів з енергією  $E$  падає зліва на ДБРТС (уздовж осі  $z$ ), перпендикулярно до її шарів.

У цьому випадку система описується повним одномірним рівнянням Шредінгера, яке, з урахуванням відомих виразів для оператора імпульсу та векторного потенціалу (у кулонівській калібровці), набуде вигляду

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U\Delta(\delta(z) + \delta(z-a)) - \frac{2i\epsilon\epsilon\hbar}{m\omega} \sin(\omega t) \frac{\partial}{\partial z} + \frac{2(e\epsilon)^2}{m\omega^2} \sin^2(\omega t) \right] \Psi(z,t), \quad (1)$$

де  $e$ ,  $m$  – заряд та маса електрона;  $U$ ,  $\Delta$  – висота та ширина потенціальних бар'єрів ДБРТС;  $a$  – ширина потенціальної ями.

Рівняння (1) у всіх областях наносистеми має, як вперше виявлено, два точних лінійно незалежних розв'язки

$$\psi^\pm(E, \omega, z, t) = \exp\left\{\pm ik_0 \left[ z + \frac{2e\epsilon}{m\omega^2} \cos(\omega t) \right] - \frac{i}{\hbar} \left[ E + \frac{(e\epsilon)^2}{m\omega^2} \left( 1 - \frac{\sin(2\omega t)}{2\omega t} \right) \right] t \right\}, \quad (2)$$

які описують пряму та обернену хвилі з квазіімпульсом  $k_0 = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}$ .

Розклад знайдених хвильових функцій (2) у ряди Фур'є дозволяє знайти повну хвильову функцію електрона в ДБРТС з урахуванням усіх польових гармонік. Це, у свою чергу, дозволяє дослідити транспортні властивості усіх каналів електронної прозорості ДБРТС.

## Фізичні системи у просторі–часі з деформованою алгеброю Гайзенберга

*Ткачук В. М.*

Кафедра теоретичної фізики,

Львівський національний університет імені Івана Франка

Вперше деформована алгебра Гайзенберга, яка описує квантований простір–час, була запропонована Снайдером у 1947 році. Пізніше дослідження в теорії струн і квантовій гравітації показали, що існує ненульова мінімальна довжина порядку планківської, так що частинку не можна локалізувати в області меншого розміру. Виявилось, що мінімальну довжину можна отримати в рамках деформованої алгебри Гайзенберга. Дослідження впливу цих деформацій на фізичні властивості як квантових, так і класичних систем останнім часом викликає значний інтерес. Я планую зробити короткий огляд цієї ділянки досліджень.

### **A novel concept for augmented van der Waals theory of liquid state**

*A. Trokhymchuk<sup>1</sup>, R. Melnyk<sup>1</sup>, I. Nezbeda<sup>2</sup>, D. Henderson<sup>3</sup>*

<sup>1</sup>**Institute for Condensed Matter Physics, Natl. Acad. Sci. Ukraine**

<sup>2</sup>**Department of Physics, J. E. Purkyně University, Czech Republic**

<sup>3</sup>**Department of Chemistry and Biochemistry, Brigham Young University, Provo, UT, USA**

The commonly used augmented van der Waals equations are based on the hard-core primary contribution to the properties of fluids. Nonetheless, this choice of the so-called reference contribution suffers from density and temperature limitations

where theory might be applied. As an attempt to remove these drawbacks we have recently formulated [1,2] an augmented van der Waals theory based on a reference system that incorporates also the attractive interaction at short separations. In this lecture the methodology of approach will be formulated and then its implementation for some representative classes of simple liquids will be demonstrated.

## References

- [1] R. Melnyk, I. Nezbeda, A. Trokhymchuk, D. Henderson, *Fluid Phase Equil.* **279**, 1 (2009).
- [2] A. Trokhymchuk, I. Nezbeda, R. Melnyk, J. *Supercritical Fluids* **55**, 448 (2010).

## **Specific features of diffusion processes in nanoscale and bulk liquid systems**

*O. Chalyi*

**Medical and Biological Physics Dept., O. O. Bohomolets National Medical University, Kyiv**

The presentation is devoted to recent studies of diffusion phenomena in finite-size mesoscale (micro- or nanoscale) and infinite (bulk) liquid systems for wide intervals of thermodynamical parameters including the critical region. Main problems to be discussed are as follows:

1. Effects of spatial limitation on diffusion processes in mesoscale individual and binary liquid systems.
2. Dependences of self-diffusion, thermodiffusion and barodiffusion properties on temperature, pressure, density, concentration.
3. Theoretical results versus experimental data for diffusion properties.
4. Peculiarities of diffusion phenomena in 2D liquid systems (biomembranes, thin surface layers, etc.).
5. Nonlinear kinetic models of cell-to-cell communication (synaptic transmission) with diffusion effects taking into account.

## **Many-body dynamics and x-ray spectroscopy of strongly correlated electron systems**

*A. M. Shvaika*

**Institute for Condensed Matter Physics, Natl. Acad. Sci. Ukraine**

Some aspects of the theoretical many-body description of the interaction of x-rays with strongly correlated electronic system are considered. For the simple model of Mott insulator an exact solutions for the core-hole propagator, which determines the *x-ray photoelectron emission spectrum* (PES), and two-particle response function core-hole–valence electron, which determines the *x-ray absorption spectrum* (XAS), are obtained. The groups of peaks which correspond to the absorption edge are separated and their behaviour for different temperatures and values of the Coulomb

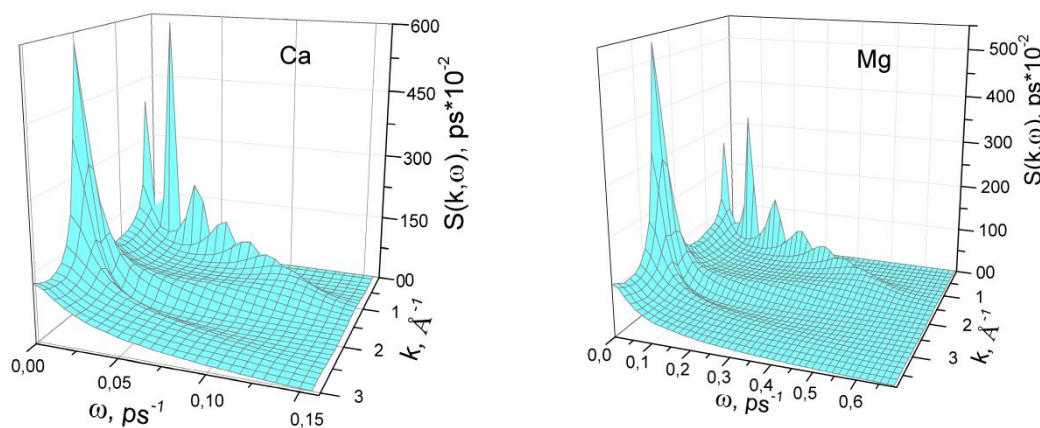
interaction is studied. The crossover from the Lorentzian peak at finite temperatures to the power law singularity or  $\delta$ -peak at zero temperature is investigated. Besides, the resonant inelastic x-ray scattering (RIXS) response functions are analysed for different values of the transferred momentum and incident photon energies (below and above the edge). The influence of the non-radiation mechanisms of the core-hole relaxation, e.g. Auger or fluorescence processes, on the PES, XAS, and RIXS spectra damping and reconstruction is investigated.

## Коллективна динаміка рідких Ca і Mg

*П. М. Якібчук, В.Р. Пацаган*

**Кафедра фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка**

Досліджено динамічні властивості рідких Ca і Mg поблизу точки плавлення. З цією метою використано парний міжіонний потенціал отриманий на основі псевдопотенціалу Фіюлхаїса та ін. [1]. Було показано, що ця модель дає достатньо реалістичний опис міжатомної взаємодії рідко-земельних металів [2]. Раніше вже нами було досліджено структурні та одночастинкові динамічні властивості для даних металів за допомогою методу молекулярної динаміки [3]. Цього разу ми зосередили свою увагу на вивченні колективної динаміки. Таким чином, нами проведено комп'ютерне моделювання для розрахунку таких характеристик, як динамічний фактор, повздовжні і поперечні кореляційні функції потоку густини. Аналіз Фур'є перетворень кореляційних функцій дозволив нам побудувати дисперсійні залежності фононних спектрів та зроблено оцінку швидкості звуку в розглянутих металах. Паралельно проведено теоретичні розрахунки відповідних дисперсійних залежностей використовуючи співвідношення Такено та Года [4], із котрих також було пораховано швидкості звуку. Зауважено, що повздовжня дисперсія добре узгоджується із комп'ютерним моделюванням практично для всіх металів, у той час, як поперечна дає гірше співпадіння. Показано, що пораховані швидкості звуку в досліджуваних металах виходять дещо переоцінені порівняно із експериментальними даними. На рис. зображено динамічні структурні фактори для Mg і Ca при різних значеннях хвильового вектора, графіки добре ілюструють величину і розміщення Релеєвських і Брілюєнівських піків, проведений їх аналіз.



## Література

- [1] C. Fiolhais, J. P. Perdew, S. Q. Armster, J. M. MacLaren, M. Brajczewska, Phys. Rev. B **51**, 14001 (1995).
- [2] J.-F. Wax, R. Albaki, J.-L. Bretonnet. Phys. Rev. B **62**, 14818 (2000).
- [3] P. M. Yakibchuk, V. R. Patsahan, T. M. Patsahan, J. Phys. Stud. **11**, 279 (2007).
- [4] S. Takeno, M. Goda, Prog. Theor. Phys. **45**, 331 (1971).

## **Self-action problem for a massless charged particle**

*Yu. Yaremko*

**Institute for Condensed Matter Physics, Natl. Acad. Sci. Ukraine**

A renormalization scheme which relies on energy-momentum and angular momentum balance equations is applied to the derivation of effective equation of motion for a massless point-like charge. It is shown that the singularities of Noether quantities carried by electromagnetic field of a point-like charge moving with speed of light can not be interpreted as the manifestation of the self-energy. The effective equation of motion is the equation on eigenvalues and eigenvectors of the electromagnetic tensor. The massless charges move along base line determined by the eigenvectors when the effective equation of motion possesses uniform solutions. It is of very importance that Rylov's model of magnetosphere of a rapidly rotating neutron star (pulsar) is based on the same solution. The equation on eigenvalues and eigenvectors of the electromagnetic tensor arises in this model as the ultrarelativistic limit of the well-known Lorentz–Dirac equation.