

**Національна академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова**

**НАЙВАЖЛИВІШІ НАУКОВІ РЕЗУЛЬТАТИ
ІНСТИТУТУ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ
ІМ. М.М. БОГОЛЮБОВА НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ
У 2024 РОЦІ**

**TOPMOST SCIENTIFIC RESULTS 2024
OF THE BOGOLYUBOV INSTITUTE
FOR THEORETICAL PHYSICS
OF THE NATIONAL ACADEMY
OF SCIENCES OF UKRAINE**

Київ 2025

Відділ фізики високих густин енергії	3
Відділ теорії ядра і квантової теорії поля	5
Відділ математичних методів в теоретичній фізиці	8
Відділ астрофізики та елементарних частинок.....	10
Відділ теорії квантових процесів у наносистемах.....	12
Відділ теорії нелінійних процесів в конденсованих середовищах	15
Відділ синергетики.....	21
Відділ комп'ютерного забезпечення наукових досліджень	25
Кафедра теоретичної і математичної фізики	26
Наукові публікації.....	27
Конференції та семінари.....	27
Нагороди та відзнаки	28

CONTENTS

Department of High-Density Energy Physics	30
Department of Theory of Nuclei and Quantum Field Theory	32
Department of Mathematical Methods in Theoretical Physics.....	35
Department of Astrophysics and Elementary Particles	37
Department of Quantum Processes in Nanosystems.....	39
Department of Nonlinear Processes in Condensed.....	42
Department of Synergetics	47
Department of Computer Maintenance.....	51
Department of Theoretical and Mathematical Physics.....	52
Scientific publications.....	53
Conferences & Seminars	53
Prizes and Awards.....	54

ВІДДІЛ ФІЗИКИ ВИСОКИХ ГУСТИН ЕНЕРГІЇ

Пошук критичної точки (КТ) КХД та її положення на фазовій діаграмі є одними з головних завдань експериментів із релятивістських зіткнень важких іонів. Корисним інструментом для розв'язання цієї проблеми є аналіз флуктуацій баріонного числа, усереднених за ансамблем події.

Проаналізовано систему, що складається з 400 класичних нерелятивістських частинок, які взаємодіють через потенціал Леннарда-Джонса (ЛД)

$$V(\mathbf{r}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{\mathbf{r}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{\mathbf{r}} \right)^6 \right].$$

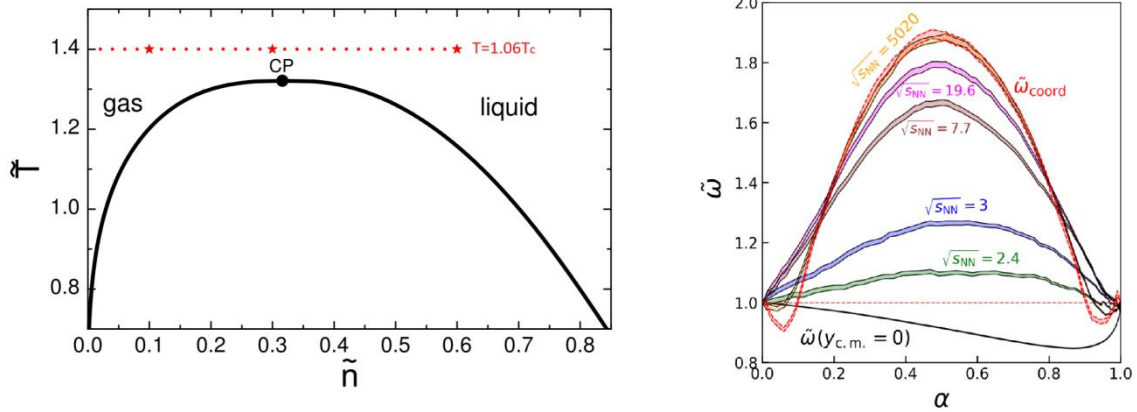
Параметри σ та ε визначають відповідно розмір області відштовхування та глибину потенціалу притягання, встановлюючи характерний масштаб довжини та енергії системи. Вивчено рівняння стану ЛД за допомогою молекулярної динаміки (МД). Фазова діаграма містить фазовий перехід першого роду рідина-газ з КТ у класі універсальності 3D-Ising, розташовану за критичної температури $\tilde{T}_c = T_c / \varepsilon \cong 1.321$ і густини числа частинок $\tilde{n}_c \sigma^3 \cong 0.316$ (Рис. 1 (зліва)). Моделювання системи ЛД в рамках МД демонструє сильні сигнали флуктуацій в околі КТ внаслідок взаємодії частинок у координатному просторі. Однак реальні вимірювання у фізиці високих енергій можливі лише в імпульсному просторі, де ці флуктуації зникають через відсутність взаємодії частинок у імпульсному просторі. Цю задачу досліджено в умовах експериментальних обмежень, характерних для зіткнень важких іонів. У зіткненнях важких іонів колективний рух викликає кореляції між координатами та імпульсами частинок під час гідродинамічної стадії еволюції системи. Щоб дослідити це, вводимо колективний потік уздовж осі зіткнення в моделювання для вивчення флуктуацій числа частинок в скінченій частині імпульсного простору.

Проведено МД моделювання трохи вище КТ за $T = 1.06 T_c$ і за різних густин числа частинок (див. Рис. 1). Розглянуто нормовану дисперсію розподілу числа частинок, визначену як

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{(1-\alpha)} \times \frac{\langle N_{\text{acc}}^2 \rangle - \langle N_{\text{acc}} \rangle^2}{\langle N_{\text{acc}} \rangle},$$

де $\alpha = \langle N_{\text{acc}} \rangle / N_0$, N_{acc} число частинок у підсистемі, та $N_0=400$.

Графік у правій частині Рис. 1 показує $\tilde{\omega}$ за $n = 0.95n_c$ як функцію частки частинок, уведених до нашого імпульсного вікна вимірювання. Різні лінії представляють різні енергії зіткнення пари нуклонів в системі центра мас в одиницях ГеВ. Можна бачити, що сильніший потік за вищих енергій допомагає зберегти флуктуаційні сигнали.



1. **Коллективний рух:** Без колективного потоку сигнали флуктуації зникають в імпульсному просторі. За наявності потоків ці сигнали стають помітними в експериментах.
2. **Важливі енергії та область детектування:** Наше дослідження показує, що найкращий діапазон енергій для пошуку критичних флуктуацій становить близько $\sqrt{S_{NN}} \approx 3-7$ ГеВ, де рух є достатньо сильним, щоб підтримувати флуктуації. Флуктуації досягають своїх максимальних значень за $\alpha \approx 0.5$, тобто коли частка зареєстрованих частинок становить близько 50% від їхньої загальної кількості.

- Kuznietsov, V.A.; Gorenstein, M.I.; Koch, V.; Vovchenko, V., 2024. Coordinate versus momentum cuts and effects of collective flow on critical fluctuations. *Phys. Rev. C* **110**, 015206. [doi:10.1103/PhysRevC.110.015206](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.015206)

В рамках інтегрованої гідрокінетичної моделі та гідродинамічної моделі, поєднаної зі статистичним кодом адронізації (LQTH) досліджено залежність піон-піонних фемтоскопічних радіусів від поперечної маси пари в області найбільш низьких значень цієї маси (< 200 МеВ/с) для центральних зіткнень ядер свинцю на Великому адронному колайдері. Встановлено, що в обох моделях поведінка радіусів в області наднизьких імпульсів відхиляється від степеневого закону, характерного для більш високих значень імпульсу. Натомість, вдається описати єдиною формулою залежність радіусів від поперечної швидкості пари за всіх відповідних значень імпульсу

пари. Незвична поведінка для піонів з наднизькими імпульсами може свідчити про своєрідне відокремлення цих частинок від решти системи та утворення своєрідної «пастки» для надм'яких піонів. (Ю.М. Синюков, В.М. Шаповал)

- Rzesza, W.; Kornakov, G.; Kisiel, A. R.; Sinyukov, Yu. M.; Shapoval, V. M., 2024. Femtoscopy analysis of ultrasoft pion trap at energies available at the CERN Large Hadron Collider. *Phys. Rev. C* **110**, 034904. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.034904>

У межах т'Хуфта-Венеціано тривимірної ефективної моделі петель Полякова обчислено кореляційні функції цих петель. Це уможливило дослідити спектр мас SU(N) моделі за ненульового баріонного хімічного потенціалу. Спектр мас виявляється комплексним, він свідчить про експоненційний спад кореляцій, модульованих осцилювальним фактором. (О.А. Борисенко, С.М. Волошин)

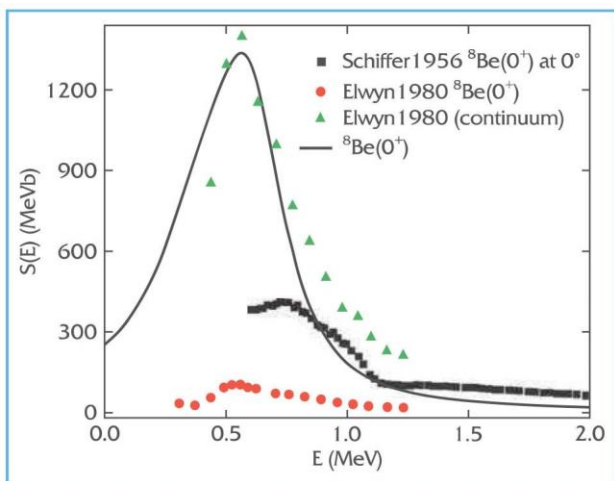
- Borisenko, O.; Chelnokov, V.; Voloshin, S., 2024. The Polyakov loop models in the large N limit: Correlation function and screening masses. *Phys. Rev. D* **109**, 094503. doi.org/10.1103/PhysRevD.109.094503

ВІДДІЛ ТЕОРІЇ ЯДРА І КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ ПОЛЯ

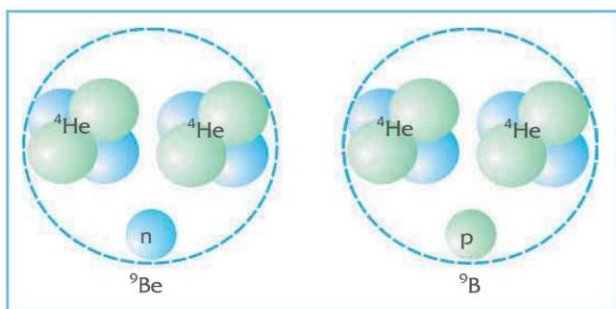
Відомо, що у перші хвилини після Великого вибуху виникли ядра легких елементів. Таке явище називається первинним нуклеосинтезом. І хоча більшість передбачень збігається зі спостереженнями, з літієм ${}^7\text{Li}$ існує проблема: його має бути у 3-4 рази більше, ніж насправді містять старі зорі.

За сучасними уявленнями, основним джерелом літію ${}^7\text{Li}$ є берилій ${}^7\text{Be}$, який під час захоплення електрона перетворюється на ${}^7\text{Li}$. Реакції, що знищують ${}^7\text{Be}$ можуть зменшувати й кількість літію. Для розуміння таких процесів досліджено ядерні реакції за низьких енергій – діапазону, в якому ядерні перетворення відбувалися на початку виникнення Всесвіту.

Зіткнення дейтронів з ядрами ${}^7\text{Be}$ і ${}^7\text{Li}$ були цілеспрямовано експериментально досліджені, що зацікавило теоретиків. Проведено мікроскопічний опис таких реакцій, що дало змогу узгодити теорію з експериментом і краще зрозуміти роль цих процесів у формуванні легких елементів. Замість звичних перерізів ядерних реакцій запропоновано метод, що використовує астрофізичні S-фактори.



Розраховані й отримані з експериментальних даних S-фактори реакції ${}^6\text{Li} + {}^3\text{He} \rightarrow {}^8\text{Be} + p$



Структура компаунд-ядер бору ${}^9\text{B}$ та берилію ${}^9\text{Be}$, що утворюються на проміжній стадії реакцій ${}^6\text{Li} + {}^3\text{He}$ та ${}^6\text{Li} + {}^3\text{H}$, відповідно

Вони враховують кулонівський бар'єр під час зіткнення частинок одного заряду та спрощують порівняння теорії з експериментом. Астрофізичні S-фактори реакцій ядер ${}^7\text{Be}$ і ${}^7\text{Li}$ з дейтронами, що їх отримали науковці інституту, досить добре узгоджуються з наявними експериментальними даними. Крім того, це дає змогу передбачати поведінку таких реакцій у діапазоні енергій, характерному для перших хвилин існування Всесвіту, коли відбувався первинний нуклеосинтез легких ядер.

Такі самі теоретичні підходи були застосовані і для аналізу реакцій літію ${}^6\text{Li}$ з тритієм ${}^3\text{H}$ чи гелієм ${}^3\text{He}$. Для цих випадків

бракує даних вимірювань, хоча теоретичні прогнози узгоджуються з наявними результатами. Виявилось, що S-фактори реакцій ${}^6\text{Li}$ з ${}^3\text{H}$ та ${}^3\text{He}$ суттєво різняться знову-таки через кулонівську взаємодію і відмінності в енергіях квантових станів компаунд-ядер берилію ${}^9\text{Be}$ та бору ${}^9\text{B}$. Однак, через недостатню кількість достовірних експериментальних даних потрібно і надалі проводити розрахунки, оскільки вони стають фактично єдиним орієнтиром для майбутніх досліджень. Дослідження мають бути спрямовані на більш точне визначення розподілу ядер ${}^6\text{Li}$ та ${}^7\text{Li}$ у ранній період Всесвіту, а отже мають наблизити розв'язання космологічної проблеми літію. (В.С. Василевський, Ю.А. Лашко, В.І. Жаба)

- Lashko, Yu. A., Vasilevsky, V.S., Zhaba, V. I., 2024. Theoretical analysis of the reactions induced by interaction of ${}^6\text{Li}$ with ${}^3\text{H}$ and ${}^3\text{He}$ nuclei. *Phys. Rev. C* **110**(3), 035806. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.035806>

Розраховано перерізи гальмівного випромінювання фотонів під час розсіювання протонів на дейтронах. Наведено розрахунки у дво- та трикластерній моделях без урахування принципу Паулі (фолдінг модель) та з коректним урахуванням принципу Паулі (метод

резонівних груп). Теоретичні розрахунки добре узгоджуються з існуючими експериментальними даними. Показано, що структура дейтрона проявляє себе за відносно невеликих енергій, а за енергії 500 MeV перерізи гальмівного випромінювання фотонів стають нечутливими до форми дейтрона. Виявлено область енергій кінцевого стану протон-дейтронної системи, де урахування принципу Паулі є важливим. (В.С. Василевський)

- Shaulskyi, K. A., Maydanyuk, S. P., Vasilevsky, V. S., 2024. Study of structure of deuteron from analysis of bremsstrahlung emission in proton-deuteron scattering in cluster models. *Phys. Rev. C*, **110**(3), 034001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.034001>

В рамках формалізму канонічного ансамблю та моделі середнього поля досліджено фазову структуру системи взаємодійних релятивістських бозонів за ненульових температур і густин ізоспіну (заряду). Показано, що за наявності притягання між частинками в такій системі, на тлі бозе-айнштайнівської конденсації додатково виникає фазовий перехід рідина–газ. Пояснено причини, чому присутність бозе-конденсату значно підвищує критичну температуру фазового переходу рідина–газ у порівнянні з температурою, отриманою для такої самої системи в рамках статистики Больцмана. (В. Гнатовський, Д. Журавель, Д. Анчишкін)

- Gnatovskyy, V.; Anchishkin, D.; Zhuravel, D.; Karpenko V., 2024. Phase diagrams of a relativistic self-interacting boson system. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 560. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.560>

В рамках квантової геометродинаміки отримано узагальнене рівняння Айнштайна-Фрідмана для однорідного та ізотропного всесвіту, що містить новий доданок до густини енергії. Цей доданок обумовлений квантовим потенціалом Бома і діє подібно до гранично жорсткої речовини. Він змінює історію розширення раннього всесвіту та розпадається швидше, ніж випромінювання у пізньому всесвіті. (В.Є. Кузьмичов, В.В. Кузьмичов)

- Kuzmichev, V.E.; Kuzmichev, V.V., 2024. The Hubble tension from the standpoint of quantum cosmology. *Eur. Phys. J. C* **84**, 121. <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-024-12490-6>

Рівняння для частинок зі спіном $S = 0$ і $S = 1$ представлено у формі системи двох рівнянь Дірака з додатковими умовами (в'язями), які накладаються на компоненти хвильових функцій. У випадку

тотожних мас (або в границі високих енергій, коли різницею мас можна нехтувати) сформульовано об'єднану систему рівнянь, частинні розв'язки якої співпадають із тими, що випливають з рівнянь для спіну $S = 0$ і $S = 1$, і одночасно є двома рівняннями Дірака для двох незалежних частинок зі спіном $S = 1/2$. (Б.Є. Гринюк)

- Grinyuk, V.E., 2024. Equations for particles with spin $S=0$ and $S=1$ in spinor representation. *Ukr. J. Phys.* **69** (11), 889. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.11.889>

Для квантового біквadraticного ангармонічного осцилятора вивчено і розраховано основні фізичні характеристики та властивості на основі застосування розкладу хвильової функції системи за повним набором власних функцій гармонічного осцилятора, тобто за базисом власних функцій незбуреного гамільтоніана. Показано збіжність розрахованих рівнів енергії ангармонічного осцилятора. Розраховано енергії основного та шести перших збуджених станів системи в дуже широкому інтервалі зміни константи зв'язку осцилятора. (В.О. Бабенко, О.В. Нестеров)

- Babenko, V. A., Nesterov, A. V., 2024. The quartic anharmonic oscillator – an oscillator-basis expansion approach. I. Energy levels study and calculation. *Nuclear Physics and Atomic Energy* **25** (3), 216-227. <https://doi.org/10.15407/jnpae2024.03.216>

ВІДДІЛ МАТЕМАТИЧНИХ МЕТОДІВ В ТЕОРЕТИЧНІЙ ФІЗИЦІ

З трьома зчепленими кільцями Борромео топологічно асоціюються, зокрема, специфічні молекулярні сполуки, тримери Єфімова із частинок, а також тип квантової запутаності. Математично, таке зчеплення описують комутаційними співвідношеннями для трьох параболічних генераторів фундаментальної групи у представленні Віртингера. Зазвичай їх реалізують за допомогою комплексних матриць два-на-два зі спеціальної лінійної групи, що належить до групи ізометрій метрики гіперболічного тривимірного (напів)простору в моделі Кляйна. Специфікою метрики цієї моделі є відсутність еквівалентності (ізотропії) між трьома осями координат, що ускладнює її застосування в задачах фізики в ізотропному просторі. Цю задачу розв'язують із застосуванням моделі кулі Пуанкаре, параболічні ізометрії метрики якої природно задаються нелінійними координатними перетвореннями Мебіуса, а не числовими матрицями.

Такі перетворення описано в першій частині роботи. З іншого боку, фундаментальна група перетворень пов'язана із симетрію тривимірного тіла, а саме, доповнення кілець Борромео, яке, згідно з В. Терстоном, має складатися з двох правильних гіперболічних октаедрів скінченного об'єму з каспідальними вершинами на безмежності (на граничній сфері). Отже, стабілізуючи три вершини одного з октаедрів знайдено три параболічні генератори (перетворення) фундаментальної групи. За їх допомогою побудовано ромбічний додекаедр з об'ємом двох октаедрів, забезпечуючи доповненню максимальну симетрію.

Також розглянуто статистичну модель напрямлених хаотичних блукань на дереві Кейлі, згенерованому фундаментальною групою кілець Борромео і вкладеному в кулю Пуанкаре з кореневою точкою в центрі. Такі шестигілкові граfi можуть імітувати дендритні полімери. Дослідження зосереджено на мультифрактальних властивостях статистичної суми, означеної для усіченого дерева N -го покоління, з ваг Больцмана для дискретних шляхів із порядком моменту q , який відіграє роль оберненої температури у фізиці, але набуває додатних і від'ємних значень. Оскільки ряд з ваг Больцмана, визначених гіперболічною відстанню між вершинами дерева порядку N , не виявляє мультифрактальності, використано функціонал із "взаємодією", квадратичною за N . Він відповідає периметричній характеристиці поверхні, утвореній суміжними трикутниками, ребра яких з'єднують кореневу точку і дві найближчі вершини дерева. Виявлено нормальну стохастизацію та обчислено числовими методами мультифрактальні показники для статистичної суми. Вони вказують на відсутність доміантної підмножини шляхів і необхідність урахування всіх графів, принаймні приблизно, у бажаному аналітичному описі. Через зумовленість поведінки центральною граничною теоремою за великих N , застосовано наближення ланцюга Маркова і аналітично обчислено статистичну суму (в наближенні Гаусса) для відносно малих абсолютних значень моменту q .

Окрім того, згідно з Р. Пеннером, побудовано простір Тейхмюллера декорованої ідеальної октаедричної поверхні, вкладеної в кулю Пуанкаре. Використовуючи конформність декорування означено шість модулів і групу класів відображення, породжену циклічними перестановками вершин. Маючи намір квантувати геометричну площу встановлено зв'язок між індукованою геометрією

та моделлю синус-Гордона. Завдяки такій відповідності отримано диференціальну двоформу в кодотичному розшаруванні. Зосереджуючись на зіркоподібному тілі, утвореному ідеальними квадратами в трьох ортогональних площинах (екваторіальних дисків), проаналізовано квантові флуктуації площі тіла, використовуючи канонічне квантування моделі синус-Гордона, що приводить до диференціального рівняння Мат'є. Оскільки квантові флуктуації площі виникають на межах геометричних областей згідно із загальними передбаченнями в квантовій геометрії ми пов'язуємо їх з декоруванням каспових (дзьобових) вершин поверхні. Використовуючи (єдиний) квантовий стан, породжений гамільтоною в'язю, отримано вказівку на наявність щілини у спектрі площі. (А.В. Назаренко)

- Nazarenko, A.A.; Nazarenko, A.V., 2024. Structures associated with the Borromean rings' complement in the Poincare ball. *Ukr. J. Phys.* **69** (7), 498-514. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.7.498>

В рамках класичних і квантових нединамічних квадратичних $abcd$ -алгебр Лакса узагальнено класичні і квантові рівняння Фределя-Має для відповідних $gl(n) \otimes gl(n)$ -значних $abcd$ -тензорів. Показано, що лінеаризація отриманих квадратичних структур приводить до лінійних тензорних структур і $gl(n) \otimes gl(n)$ -значних r -матриць, які задовольняють узагальнене класичне рівняння Янга-Бакстера. Для випадку з деформованою Z_n -градуваною r -матрицею явно побудовано відповідні $abcd$ -тензори, класичні і квантові. (Т.В. Скрипник)

- Skrypnyk, T., 2024. On a new class of non-dynamical $ABCD$ algebras for classical and quantum integrable systems. *Nuclear Phys. B* **1008**, 116685. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2024.116685>

ВІДДІЛ АСТРОФІЗИКИ ТА ЕЛЕМЕНТАРНИХ ЧАСТИНОК

Досліджено енергію зв'язку електрона E_b однозарядного донора в двошаровому графені з верхнім і нижнім затворами, рознесеними на певну відстань, і з регульованою щілиною Δ в дисперсії носіїв. Встановлено, що для відстаней в діапазоні від 10 до 200 нм і щілин від 1 до 70 меВ відношення E_b/Δ змінюється від 0,4 до 1,4. Це співвідношення залишається близьким до одиниці через домінуючу роль двошарового поляризаційного екранування, яке зменшує глибину кулонівської потенціальної ями до значень щілини Δ .

(академік НАН України В.П. Гусинін, член-кореспондент НАН України Е.В. Горбар)

- Gorbar, E.V., Gusynin, V.P., Oriekhov, D.O., Shklovskii, B.I., 2024. Electron binding energy of donors in bilayer graphene with a gate-tunable gap. *Phys. Rev. B* **109**, 165145. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.165145>

Відкрито широкі компоненти, характерні для вибухового витоку іонізованої речовини в профілях емісійних ліній водню та гелію в двох карликових компактних галактиках низької металічності з активним зореутворенням. Ці галактики мають малі маси в декілька мільйонів мас Сонця, низький вміст кисню 0.1 і 0.05 сонячного вмісту, високу дисперсію швидкостей ~ 700 і ~ 1200 км/с і максимальні швидкості зоряного вітру відповідно ~ 1000 і ~ 1000 – 1700 км/с. Для першої галактики нам вдалося зафіксувати фазу виверження шляхом моніторингу варіацій відношень потоків широких і вузьких компонентів. У 2017 році відбулось різке збільшення цього відношення в 4 рази та його зменшення приблизно на порядок у 2023 році. Пікова світність широкого компонента лінії $\text{H}\alpha$ тривала впродовж 6 років із трьох десятиліть моніторингу. Це дає нам підстави зробити висновок, що в інтегральному спектрі цієї галактики, ймовірно, знайдено зірку класу яскравих блакитних змінних зірок (LBV), яка спричинила ознаки виверження. Дуже висока світність широкого компоненту лінії $\text{H}\alpha$ в другій галактиці, близька до значень, що спостерігаються в активних галактичних ядрах і наднових зірках, а також незначна змінність відношення потоків широкого до вузького компонентів емісійних ліній водню та гелію на рівні не більше 20 відсотків протягом 8 років моніторингу не дає нам змоги остаточно зробити висновок, що ця галактика містить LBV. (Ю.І. Ізотов, Н.Г. Гусева)

- Guseva, N.G., Thuan, T.X., Izotov, Y.I., 2024. Monitoring broad emission-line components in spectra of the two low-metallicity dwarf compact star-forming galaxies SBS 1420+540 and J1444+4840. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **527** (2), 3932-3944. <https://doi.org/10.1093/mnras/stad3485>

Побудовано просту масштабно-інваріантну дію, що зв'язує поле Гітса з метричною скалярною кривиною R і містить член R^2 , яка виявляє спонтанне порушення масштабної інваріантності та електрослабкої симетрії. За такої умови в польовій системі Айнштейна коефіцієнт при члені R^2 визначає самодію бозона Гітса, а скалярон стає дилатоном, слабкозв'язаним з бозоном Гітса.

Майоранівські масові члени для правих нейтрино можна отримати у масштабно-інваріантний спосіб, використовуючи інваріант поля Гітса. У цьому випадку наявні експериментальні обмеження на повну ширину розпаду бозона Гітса не враховують значення майоранівської маси нейтрино в діапазоні від 10 до 60 ГеВ. Модель успадковує проблеми загальної теорії відносності, пов'язані з малістю гравітаційної і космологічної констант. (Ю.В. Штанов)

- Shtanov, Y., 2024. Electroweak symmetry breaking by gravity. *Journal of High Energy Physics* **02**, 221. [https://doi.org/10.1007/JHEP02\(2024\)221](https://doi.org/10.1007/JHEP02(2024)221)

Для одновимірної системи точкових безспінових бозонів з нульовими граничними умовами показано, що всі стаціонарні розв'язки рівняння Гросса-Пітаєвського, окрім основного стану, є особливими: вони відповідають не тільки конденсату N атомів, але й конденсату N елементарних квазічастинок. Такі розв'язки є солітоноподібними. (М.Д. Томченко)

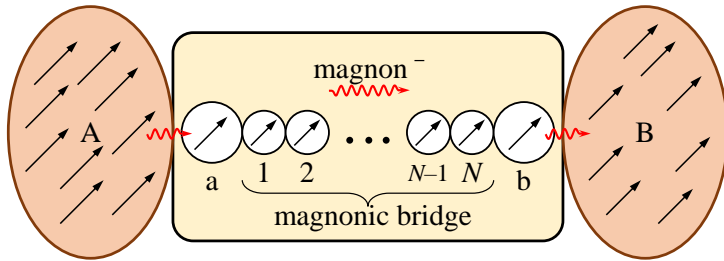
- Tomchenko, M., 2024. Nonuniform Bose–Einstein condensate: II. Doubly coherent states. *J. Phys. A: Math. Theor.* **57**, 495205. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ad9188>

ВІДДІЛ ТЕОРІЇ КВАНТОВИХ ПРОЦЕСІВ У НАНОСИТЕМАХ

Розвиток квантових інформаційних технологій показав, що заряджені частинки мало придатні для передавання інформації. Це пов'язано з джоулевым теплом, яке виділяється в пристрої під час транспортування заряду. Тому для передавання інформації на нанорозмірні відстані краще використовувати незаряджені носії. Зокрема, запропоновано використовувати спінові збудження впорядкованих парамагнетних іонів, так званих магنونів. Оскільки рухом магنونів можна керувати як магнетним полем (що діє на магнетний момент парамагнетного іона), так і електричним полем (через деформацію кристалічного поля лігандів), це робить магнони придатними для використання в квантових комунікаціях.

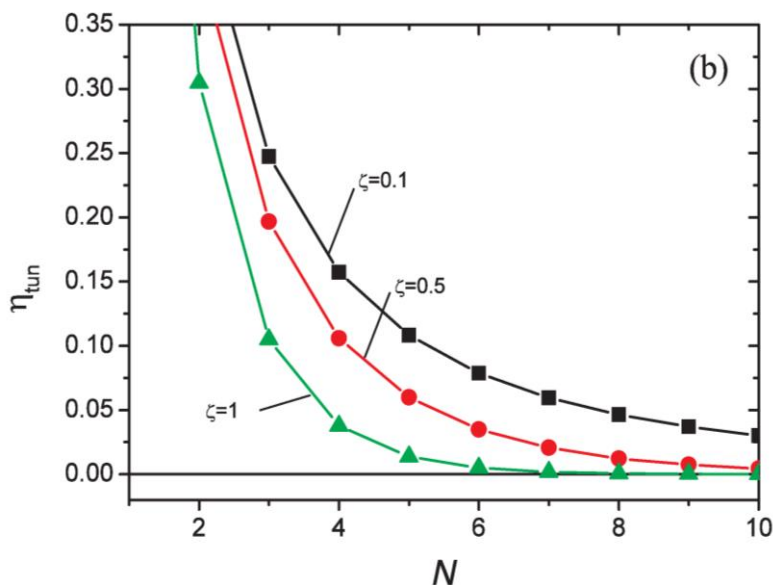
Відомо також, що магнони досить добре взаємодіють з фононами і фотонами – відповідно, квантами коливань атомних ядер і квантами електромагнетного поля. На основі цього факту вдалося створити гібридні пристрої, що являють собою мікропорожнини зі вставленими в них наномагнетами. У таких гібридних фотон-магنونних резонаторах виникають електромагнетні коливання з

частотами порядку гігагерців і терагерців, що також відповідає частотам збудження статичних (кітельівських) магنونів. Це відкриває широкі можливості для генерації квантів одного типу збудження в кванти іншого типу для використання гібридних фотон-магنونних резонаторів у квантовій техніці. У роботі [E.G. Petrov, *J. Appl. Phys.*



156, 134301 (2024)] запропоновано фізичний механізм реалізації квантового зв'язку між фотон-магنونними резонаторами, за яким

магنونи, що генеруються в наноманеті одного з резонаторів (А чи В), можуть бути передані в інший резонатор через ферромагнетні нанорозмірні ланцюжки (Рис. 1).



Показано, що таке перенесення може відбуватися двома шляхами, а саме шляхом послідовних стрибків магнона вздовж усіх ланок ланцюга, і шляхом тунелювання магнона між кінцевими ланками *a* і *b* ланцюга. Виявлено аналітичну залежність відповідних швидкостей передачі від кількості

парамагнетних місткових ланок *N* і наведено магنونний аналог ефектів Зеєбека та Пельтьє, які характеризують ефективність магنونного квантового перенесення. Тунелювання магنونів безпосередньо впливає з експоненціального меншання швидкості перенесення магنونів з більшанням кількості ланок ланцюга (Рис. 2).

Отже, тунельний транспорт магنونів через місткові ферромагнетні структури вказує на специфічний когерентний механізм реалізації квантових комунікацій з використанням незаряджених носіїв. (член-кор. НАН України Е.Г. Петров)

- Petrov, E.G, 2024. Long-range magnon transfer across a bridging ferromagnetic chain via sequential and tunnel routes. *J. Appl. Phys.* **135** (13), 134301. <https://doi.org/10.1063/5.0197658>

Виявлено визначальну роль кінетики переходів у фотоактивних молекулярних діодах під час формування оптоелектронних процесів, зумовлених тунелюванням електронів між наконечником тунельного мікроскопа та флуорофором, а також між флуорофором і металевим наноелектродом. Показано, що ця кінетика контролює як струм через флуорофор, так і електролюмінесценцію флуорофора, зокрема електрофлуорохромію. (член-кор. НАН України Е.Г. Петров, О.Л. Капітанчук, Є.В. Шевченко)

- Petrov, E., Kapitanchuk, O., Shevchenko, Ye., Gorbach, V., Lyubchik, A., 2024. Features of optoelectronic processes in a molecular junction based on a fluorophore with optically active frontier π -orbitals: electrofluorochromism in a ZnPc-based junction. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** (34), 22761-22774. <https://doi.org/10.1039/D4CP01328J>

Виконано квантово-хімічні розрахунки в рамках теорії функціоналу густини (DFT) та проаналізовано дані сканувальної тунельної мікроскопії (STM) самоорганізованих моношарів сегнетоелектричних нематичних рідиннокристалічних молекул, адсорбованих на атомарно плоскій поверхні золота Au(111). В результаті побудовано модель пакування молекул у моношарі, що характеризується високим ступенем полярного впорядкування молекул. (О.Л. Капітанчук)

- Marchenko, A.A., Kapitanchuk, O.L., Lopatina, Ya.Yu., Nazarenko, K.G., Senenko, A.I., Katsonis, N.H., Nazarenko, V.G., Lavrentovich, O.D., 2024. Polar self-organization of ferroelectric nematic-liquid-crystal molecules on atomically flat Au(111) surface. *Phys. Rev. Lett.* **132** (9), 098101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.132.098101>

Отримано умову ефективності ресетингу в пошукових процесах. Вона показує, що ресетинг може покращувати пошук навіть за вузького розподілу часів першого досягнення (і навпаки, погіршувати його за широкого розподілу). Це перевірено чисельно на прикладі випадкових блукань в 1D ґратках. Для квантових блукань описано еволюцію та нерівноважний стаціонарний стан системи, що відрізняється локалізацією в околі вузла ресетингу; обчислено середнє та середньоквадратичне зміщення. (Л.М. Христофоров)

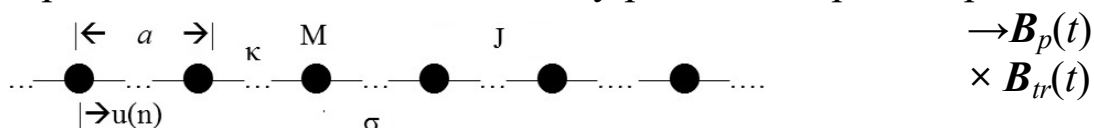
- Christophorov, L.N., 2024. Continuous time random walks with resetting in a bounded chain. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 591-599. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.591>

Вивчено локалізацію електронів в подвійній квантовій системі, утвореній парою квантових точок. Розраховано енергетичний спектр та спектральний розподіл локалізованих і делокалізованих електронів. Проведено порівняння симетричних і асиметричних квантових ям. Запропоновано реалізацію зарядового кубіту на подвійних квантових точках. (С.П. Кручинін)

- Filikhin, I., Karouia, A., Zatezalo, T., Kruchinin, S., Vlahovic, B., 2024. Effect of double quantum dot asymmetry on electron localization. *Mod. Phys. Lett. B* 38 (21), 2342005. <https://dx.doi.org/10.1142/S0217984923420058>

ВІДДІЛ ТЕОРІЇ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В КОНДЕНСОВАНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Солітони у низьковимірних молекулярних системах відіграють особливу роль в процесах транспорту енергії та зарядів, оскільки вони є майже бездисипативними станами. До таких молекулярних систем належать біологічні макромолекули, електропровідні полімери, новітні низьковимірні функціональні матеріали, що їх широко використовують в сучасних нанотехнологіях. Схематично такі системи зображені на Рисунку, де чорні кружечки позначають елементарні комірки ланцюжка, маса яких M , три крапки – зв'язки між сусідніми молекулами, a – рівноважна відстань між ними, $u(n)$ – зміщення молекули у вузлі n з її рівноважного положення, J – резонансна (обмінна) взаємодія, κ – пружність ланцюжка, σ – стала електрон-фононного зв'язку, яка і лежить в основі утворення солітонів. Ключову роль у властивостях солітона відіграє безрозмірна стала електрон-фононої взаємодії, $g = \sigma^2 / 2J\kappa$, яка є одночасно і параметром нелінійності в нелінійному рівнянні Шредінгера.



Молекулярний ланцюжок та поперечне і паралельне магнетне поле

І в біологічних системах, і в приладах на основі молекулярних ланцюжків солітони можуть зазнавати впливу зовнішніх полів, зокрема змінних у часі магнетних полів, що порушує важливе питання про вплив таких полів на властивості солітонів. Саме тому

ми дослідили динаміку Давидовського солітона в осцилювальному у часі магнетному полі $\mathbf{B}(t)=\mathbf{B}_0\sin(\omega t)$. Для цього розглянуто два випадки, коли поле і перпендикулярне, і паралельне до осі ланцюжка, оскільки у випадку довільної орієнтації поля його можна представити у вигляді таких двох компонент.

Показано, що у випадку паралельного магнетного поля $B_p(t)$ динаміка солітона складається з поширення «вільного» солітона (солітона за відсутності поля) вздовж ланцюжка та коливального руху вільного електрона у поперечній до ланцюжка площині, який описується функціями гармонічного осцилятора з частотою коливань ω_0 , пропорційною до напруженості зовнішнього поля $B_p(t)$, а отже залежною від частоти поля. Циклотронна маса визначається поперечними компонентами тензора маси електрона у ланцюжку.

У випадку поперечного магнетного поля $B_{tr}(t)$ хвильова функція солітона є суперпозицією плоскої хвилі електрона у площині, перпендикулярній до молекулярного ланцюжка, та поздовжньої компоненти функції, яка задовольняє модифіковане нелінійне рівняння Шредінгера з додатковим членом, що враховує вплив магнетного поля та містить малий коефіцієнт. Малість додаткового члена дає змогу застосувати теорію збурень для розв'язку рівняння на основі методу оберненої задачі розсіювання. Згідно з цією теорією хвильова функція солітона має стандартний вираз, але параметри в якому у загальному випадку є повільно змінними у часі. Відповідні розрахунки для отриманого конкретного виразу збурення показують, що ширина солітона та його амплітуда постійні і не залежать від магнетного поля, тоді як його швидкість і фаза є осцилювальними у часі функціями з частотою основної гармоніки, заданою частотою магнетного поля.

Показано також, що за наявності дисипації енергії швидкість солітона обмежена згори завдяки балансу енергії, поглинутої від магнетного поля, та її втратою через випромінювання лінійних звукових хвиль і дисипації енергії.

Розраховано випромінювання солітона, зумовлене залежністю його швидкості від часу, та показано, що воно найбільш інтенсивне за резонансної частоти поля, яка пропорційна до параметру нелінійності g нелінійного рівняння Шредінгера та швидкості звуку у молекулярному ланцюжку.

Такий складний вплив часозалежного магнетного поля на транспорт зарядів, зумовлений солітонами, може впливати на

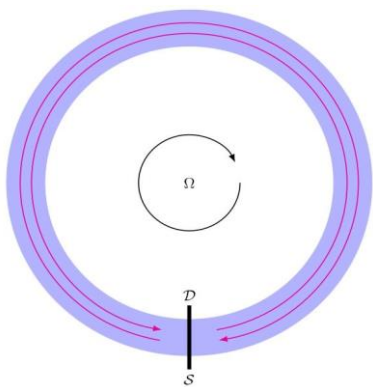
функціонування приладів на основі низькорозмірних матеріалів. Ці результати пропонують також фізичний механізм резонансних терапевтичних ефектів магнетного поля як резонансний вплив на динаміку солітонів, що забезпечують транспорт зарядів вздовж макромолекул в окислювально-відновлювальних реакціях.

Одержані результати важливі не лише з погляду фундаментальної фізики та біофізики, а й експериментальної фізики та сучасних технологій, а також важливі для розуміння процесів, що відбуваються в живих організмах і, зокрема, механізмів впливу зовнішніх електромагнетних полів на них. Останнє також важливе з огляду на розвиток сучасних медичних методів лікування з використанням змінних магнетних полів та для розуміння впливу таких полів на екосистеми, а також через електромагнетне забруднення довкілля. (Л.С. Брижик)

- Brizhik, L., 2024. Dynamics of the Davydov's soliton in external oscillating magnetic field. *Chaos, Solitons and Fractals* **187**, 115459. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2024.115459>

Ефект Саньяка – це фазовий зсув між двома когерентними хвилями, такими як світло, що рухаються в протилежних напрямках в інтерферометрі, встановленому на обертовому диску. Цей принцип лежить в основі різних сучасних навігаційних систем. Зокрема, лазерні гіроскопи, засновані на ефекті Саньяка, широко застосовують у високоточних військових системах, включно із сучасною зброєю.

Схема експерименту Саньяка: Два промені світла виходять з джерела (S) і рухаються в протилежних напрямках по колу – один за годинниковою стрілкою, а інший проти годинникової стрілки. Платформа, яка містить як джерело світла, так і екран для спостереження інтерференції, обертається за годинниковою стрілкою. Після повного оберту промені сходяться на детекторі (D), де між ними виникає інтерференція.



Величина фазового зсуву прямо пропорційна до площі, яку охоплюють світлові промені, до частоти світла і кутової швидкості обертання інтерферометра.

Враховуючи, що матеріальні частинки також мають хвилеподібні властивості, ефект Саньяка був експериментально спостережений на вільних електронах у вакуумі, нейтронах і навіть атомах. До того ж, коли ефект Саньяка реалізується на електронах, вислідний фазовий зсув в інтерференційній картині приблизно в мільйон разів більший, ніж для світла, оскільки фазовий зсув для матеріальних частинок пропорційний до їхньої маси спокою.

Перед нами постало теоретичне питання про те, як ефект Саньяка проявлятиметься в твердотільних інтерферометрах, що використовують вільні електрони в моношаровому графені. Графен відомий своєю нульовою ефективною масою носіїв і лінійною дисперсією електронів, подібною до дисперсії світла.

У нашому дослідженні ми виявили, що, незважаючи на ці унікальні властивості, ефект Саньяка в графені все одно визначається саме масою вільного електрона. Як наслідок, ефект у графені залишається приблизно в мільйон разів сильнішим, ніж у світлових інтерферометрах. Параметри існуючих зразків графену уможливають практичну реалізацію ефекту Саньяка в графені. Наші дослідження поглиблюють розуміння фундаментальних квантових принципів у застосуванні до обертових твердотільних систем. (С.Г. Шарапов, Ю.В. Штанов)

- Fesh, A.Yu., Shtanov, Yu.V., Sharapov, S.G., 2024. Sagnac effect in a rotating ring with Dirac fermions. *Phys. Rev. B* **110**, L121402.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.L121402>

В рамках методу молекулярної динаміки виконано дослідження аномально вигнутих конформацій молекул природних поліамінів – спермідину³⁺, що взаємодіють з подвійною спіраллю ДНК. Показано, що аномально вигнуті конформації молекули спермідину³⁺ є результатом взаємодії всіх трьох аміногруп поліаміну з фосфатними групами ДНК з боку мінорного жолоба подвійної спіралі. Зміни торсійних кутів зігнутої молекули спермідину³⁺ пояснено з погляду конформаційних перетворень шести- і семичленних кілець, аналогічних до циклогексану і циклогептану. Аналіз розташування молекул спермідину³⁺ вздовж макромолекули ДНК виявив специфічність до послідовності нуклеотидів з вираженою перевагою до А-трактів з боку мінорного жолоба. Утворення аномально вигнутих конформацій спермідину³⁺ у комплексі з подвійною спіраллю ДНК може мати першорядне значення для розуміння

механізмів, що лежать в основі біологічного функціонування ДНК. (С.М. Перепелиця)

- Perepelytsya, S., Vasiliu, T., Laaksonen, A., Engelbrecht, L., Mocci, F., 2024. Unusual bending patterns of spermidine³⁺ bound to DNA double helix. *Low Temp. Phys.* **50** (3), 204–214. <https://doi.org/10.1063/10.0024969>

Розраховано транспорт електронів через молекулярний пристрій, що складається з молекули, яка приєднана до макроскопічних електродів і змодельована як d-кратно вироджений рівень із сильним електрон-фононим зв'язком та міжелектронною взаємодією, що усуває виродження. У молекулі сила зв'язку може приводити до притягування між електронами. Показано, що у цьому випадку залежність заповнення рівнів від напруги стає нелінійною, а транспортні властивості системи суттєво змінюються. Методом транспортної спектроскопії визначено рівні (основні і збуджені), через які відбувається тунелювання, а також орієнтацію спінів електронів на цих рівнях. (О.О. Понежа)

- Ponezha, E.A., 2024. Electron transport through degenerate electron level in single-molecular junction in the presence of electron-vibrational coupling and attractive electron-electron correlations. *Low Temp. Phys.* **50** (5), 409. <https://doi.org/10.1063/10.0025624>

В рамках нового підходу, заснованого на точному розв'язку рівняння Дірака з потенціалом Кулона, розраховано радіаційні поправки, які усувають випадкове виродження в спектрі релятивістського атома водню і приводять до модифікації закону Кулона. З урахуванням цих поправок отримано енергетичний спектр атома водню та розраховано лембівський зсув для найнижчих енергетичних станів. (акад. НАН України В.М. Локтєв, Л.С. Брижик, О.О. Єремко)

- Eremko, A.A., Brizhik, L.S., Loktev, V.M., 2024. To the theory of the Lamb shift in the relativistic hydrogen atom. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 537. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.537>

Досліджено рух флюксона в масиві джозефсонівських контактів з несинусоїдальною струм-фазовою залежністю. Отримано рівняння руху флюксона в такому масиві з дипольною просторовою домішкою. Змодельовано динаміку флюксона та показано можливість співіснування флюксонів з різними рівноважними швидкостями для однакового значення зовнішнього струму. Проаналізовано вплив

другої гармоніки струм-фазової залежності на чутливість динаміки флюксона до початкових умов. Показано, що зміна полярності неоднорідності суттєво впливає на рухливість та динаміку флюксона. Розраховано пороговий струм закріплення флюксона на домішці. (І.О. Стародуб, Я.О. Золотарюк)

- Starodub, I.O., Zolotaryuk, Y., 2024. Discreteness effects on the fluxon interaction with the dipole impurity in the Josephson transmission line. *Phys. Lett. A* **503**, 129414. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129414>

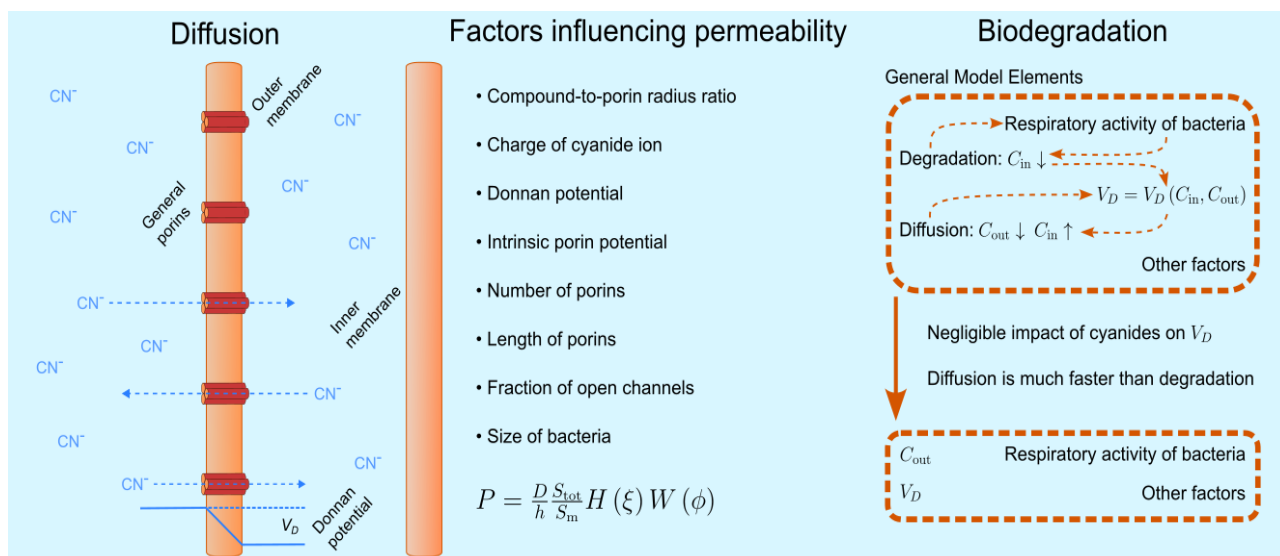
Побудовано нову нелінійну інтегровну систему параметрично урухомлюваних псевдоекситонів на регулярній двоніжковій драбинчатій ґратці. Часові залежності параметрів міжвузлових зв'язків системи є послідовно означеними в термінах супутнього параметричного урухомлювача, формалізованого чотирма звичайними однорідними лінійними диференціальними рівняннями з часозалежними коефіцієнтами. Фізично змістовна версія запропонованої параметрично урухомлюваної нелінійної динамічної системи допускає компактне Гамільтонове формулювання, в якому дві пари польових функцій набувають сенсу двох пар канонічно спряжених польових амплітуд. (О.О. Вахненко)

- Vakhnenko, O.O., Vakhnenko, V.O., 2024. Development and analysis of novel integrable nonlinear dynamical systems on quasi-one-dimensional lattices. Parametrically driven nonlinear system of pseudo-excitations on a two-leg ladder lattice. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 577–590. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.577>

Представлено точний розв'язок задачі власних значень для спряжених олігомерів поліпарафенілену і полінафталену різної довжини, які можуть служити структурними блоками для кріслоподібних та $(2m,m)$ графенових нанострічок. Показано, що електронний спектр полінафталену містить в собі локалізовані стани на відміну від спектра поліпарафенілену, який складається (як і спектри кріслоподібних графенових нанострічок довільної ширини) лише з нелокалізованих станів. Знайдено явні аналітичні вирази для коефіцієнтів розкладу хвильових функцій цих спряжених олігомерів. (Л.І. Малишева)

- Malysheva, L., 2024. Electronic structure of conjugated oligomers that are building blocks for achiral and chiral graphene nanoribbons *Chem. Phys. Lett.* **836**, 141048. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2023.141048>

ВІДДІЛ СИНЕРГЕТИКИ



Розглянуто одну з найбільш нагальних екологічних проблем сучасної промисловості – забруднення водних ресурсів ціанідними сполуками. Щороку такі галузі як видобуток золота та виробництво ювелірних виробів продукують мільярди літрів стічних вод, забруднених ціанідами, що становить серйозну загрозу як для здоров'я людей, так і для довкілля. Хоча існують різні методи очищення, біологічне очищення з використанням бактерій виявилось найперспективнішим рішенням завдяки своїй економічній ефективності та екологічності.

Це дослідження пояснює детальні механізми транспорту ціанідів через бактеріальні мембрани – критичний етап, який визначає, наскільки ефективно бактерії можуть видаляти ці сполуки із забрудненої води. Таке розуміння є вкрай потрібним для розроблення ефективніших методів очищення води від ціанідного забруднення. Значущість цієї роботи підтверджено кількома основними досягненнями.

1. Створено математичну модель, яка точно описує у який спосіб різні типи ціанідних сполук проходять через бактеріальні мембрани. Це дає змогу прогнозувати, які бактерії будуть найефективнішими для очищення води та за яких умов вони працюватимуть найкраще.
2. Пояснено, чому деякі типи ціанідних сполук легше обробляють бактеріями, ніж інші. Таке розуміння є вирішальним для вдосконалення промислових процесів очищення води.

3. Розроблена теоретична база дає змогу визначити оптимальні умови для бактеріального очищення води, забрудненої ціанідами, що значно підвищить ефективність очищення та знизить витрати.

Практичне значення цієї роботи особливо важливе для країн з розвинутою гірничодобувною промисловістю, де ціанідне забруднення водних ресурсів є серйозною екологічною проблемою. Одержані результати створюють наукове підґрунтя для розроблення ефективніших та екологічно чистіших методів очищення води, які можуть значно заощадити кошти у промислових процесах очищення води. (В. Яковлєв, акад. НАН України Б.І. Лев)

- Yakovliev, V., Lev, B. Impact of bacterial outer membrane and general porins on cyanide diffusion and biodegradation kinetics, 2024. *J. Hazard. Mater.* **480**, 136117. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.136117>

Продемонстровано переваги опису геометричної природи фізичних властивостей раннього Всесвіту за допомогою алгебри Кліффорда. Використано геометричне зображення хвильової функції раннього Всесвіту та запропоновано новий механізм спонтанного порушення симетрії з різними ступенями свободи. Виявлено можливу суперсиметрію та показано, що енергію початкового вакууму можна вважати рівною нулеві. Походження баріонної асиметрії можна пояснити за допомогою геометричного представлення хвильової функції раннього Всесвіту. (акад. НАН України Б.І. Лев)

- Lev, B., 2024. Application of Clifford's algebra to describe the early Universe. *Mathematics* **12**, 3396. <https://doi.org/10.3390/math12213396>

Сформульовано рівняння Фоккера–Планка для функцій розподілу макроскопічних відкритих систем у просторі повільно змінних фізичних величин (енергії, адіабатичних інваріантів тощо). Стаціонарний розв'язок отриманих рівнянь визначає квазірівноважну функцію розподілу у такому просторі. Запропонований підхід враховує еволюцію систем під дією дисипації та дифузії у просторі відповідних змінних. Показано, що відомий степеневий закон розподілу можна отримати, якщо врахувати внутрішні та зовнішні флуктуації в статистичних системах. (акад. НАН України Б.І. Лев, акад. НАН України А.Г. Загородній)

- Lev, B., Zagorodny, A., 2024. Fluctuations and power Low distribution function in nonequilibrium systems. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 519–527. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.519>

Некласичність є фундаментальним поняттям у квантовій оптиці. Некласичний стан світла – це стан, який не може бути представлений як статистична суміш когерентних станів. Мотивація цього визначення полягає у тому, що когерентні стани вважають класичними, оскільки їх можна описати класичною електродинамікою. Некласичні стани можуть виявляти властивості, недосяжні для їхніх класичних аналогів, таких як субпуасонівська статистика або квадратурне стиснення.

Однак не всяке вимірювання може виявити некласичність стану. У деяких експериментах статистику вимірювання некласичного стану можна симулювати за допомогою суміші когерентних станів. Така статистика називається класичною. І навпаки, якщо статистику вимірювань не можна симулювати сумішшю когерентних станів, то вона є некласичною, а стан, що його вимірювали, обов'язково є некласичним.

Виявлення некласичності статистики вимірювання є нетривіальною задачею. Припустимо, що вимірюється лише статистика фотовідліків за допомогою детектора, який може видати в результаті вимірювання одне з N значень. Задача визначання того, чи статистика, отримана з такого експерименту, є класичною, еквівалентна визначанню того, чи точка N -вимірному простору лежить всередині опуклої оболонки кривої, що представляє в експерименті класичну статистику.

Загальний підхід до цієї проблеми полягає у визначанні набору нерівностей, подібних до нерівностей Белла. Статистика є класичною тоді і тільки тоді, коли для будь-якого N -вимірному вектора виконується відповідна нерівність. Недоліком цього підходу є те, що розгляд усіх можливих нерівностей сильно ускладнюється збільшенням N .

Однак, немає потреби розглядати всі можливі нерівності. Для кожного експерименту існує підмножина таких нерівностей, за виконання яких виконуються і всі інші нерівності. Такі нерівності називаються жорсткими. У нашій роботі ми формалізували це твердження і використали його для отримання жорстких нерівностей для статистики фотовідліків з реалістичними детекторами.

За допомогою отриманих жорстких нерівностей ми виявили некласичність статистики фотовідліків для фазостисненого когерентного стану. Важливість цього результату полягає у тому, що таку статистику раніше вважали класичною.

Отже, ми вивели жорсткі нерівності для визначання неklasичності статистики фотовідліків, отриманої за допомогою довільного детектора. Такі нерівності суттєво зменшують складність визначання неklasичності і були використані для виявлення неklasичності статистики фотовідліків фазостисненого когерентного стану. (В.С. Ковтонюк, Є.В. Столяров, А.О. Семенов)

- Kovtoniuk, V. S., Stolyarov, E. V., Kliushnichenko, O. V., Semenov, A. A., 2024. Tight inequalities for nonclassicality of measurement statistics. *Phys. Rev. A* **109**, 053710. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.013701>

Виведено загальну формулу розподілу ймовірностей фотовідліків у схемах Гаусової бозонної дискретизації (ГБД) з довільними детекторами. ГБД – це модель неуніверсальних квантових обчислень, що претендує на демонстрацію квантової переваги з використанням сучасних технологій. Показано, що недоліки реалістичних методів детектування, зокрема мертвий час, значно впливають на результати квантових обчислень. Запропоновано адаптацію методів валідації результатів таких обчислень у разі використання неідеальних детекторів. (І.С. Єременко, М.А. Дмитрук, А.О. Семенов)

- Yeremenko, I.S., Dmytruk, M. A., Semenov, A. A., 2024. Realistic photon-number resolution in Gaussian boson sampling. *Phys. Rev. A* **110**, 043715. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.110.043715>

За допомогою числового моделювання визначено часову когерентність квантових світлових імпульсів, що поширюються в турбулентній атмосфері. Це дало змогу знайти часові інтервали, протягом яких зберігаються важливі квантові властивості. Зокрема, знайдено часові характеристики для збереження заплутаності станів, що кодуються дискретними та неперервними змінними, а також для оптичної неklasичності. (М. Клен, А.О. Семенов)

- Klen, M., Vasylyev, D., Vogel, W., Semenov, A. A., 2024. Time correlations in atmospheric quantum channels. *Phys. Rev. A* **109**, 033712. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.033712>.

Для моделі виробництва «витрати-випуск» встановлено необхідні та достатні умови, за яких економічна система функціонує в режимі сталого розвитку. На основі опису всіх розв'язків певної системи лінійних рівнянь та нерівностей, що їх задовольняє вектор реального споживання, зроблено повний опис рівноважних станів в моделі економіки «витрати-випуск», за яких має місце частковий

кліринг ринків. Доведено існування сім'ї векторів оподаткування в моделі виробництва «витрати-випуск». Знайдено обмеження для вектора оподаткування, за яких економічна система спроможна функціонувати в режимі сталого розвитку. (М.С. Гончар)

- Gonchar, N.S, 2024. Economy function in the mode of sustainable development. *Advances in Pure Mathematics* **14**, 242-282.
<https://doi.org/10.4236/apm.2024.144015>

КОМП'ЮТЕРНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

Найважливішим результатом виконання проєкту «Впровадження Репозитарію відкритих даних DataverseUA та розробка сервісів для забезпечення надійного функціонування. Розділ 1. Введення в промислову експлуатацію Репозитарію відкритих даних НАН України DataverseUA та забезпечення розміщення та зберігання наукових даних» є підготовка та введення в промислову експлуатацію Репозитарію відкритих даних НАН України DataverseUA. Репозитарій DataverseUA надає відкритий доступ користувачам до інформації, що в ньому зберігається, зокрема до наборів дослідницьких даних та інших пов'язаних з ними файлів в електронній формі, розміщених на умовах відкритого доступу, через офіційний вебпортал Репозитарію DataverseUA за посиланням <https://opendata.nas.gov.ua/>. Розроблено Регламент Репозитарію відкритих даних НАН України, який є основним нормативним документом для функціонування Репозитарію DataverseUA. Регламент визначає порядок функціонування та експлуатації Репозитарію DataverseUA, процедуру його наповнення наборами даних, їх зберігання, систематизації, надання інформації у відкритий доступ. Розроблено та введено в експлуатацію допоміжний сайт, що забезпечує оброблення заявок від користувачів НАН України на розміщення даних досліджень в Репозитарії DataverseUA і містить необхідні методичні матеріали для користувачів. Розміщені в Репозитарії DataverseUA набори даних досліджень співробітників НАН України отримують унікальний ідентифікатор DOI, що забезпечує пошук та повторне використання даних досліджень зі збереженням авторських прав надавача набору даних. (С.Я. Свістунов, П.В. Свірін, Ю.В. Гончар, В.В. Пелих)

КАФЕДРА ТЕОРЕТИЧНОЇ І МАТЕМАТИЧНОЇ ФІЗИКИ

Кафедра теоретичної та математичної фізики (ТМФ) Київського академічного університету (КАУ) при Інституті теоретичної фізики (ІТФ) ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України забезпечує навчання і підготовку магістрів за науково-освітньою програмою «Теоретична та математична фізика». Зокрема, викладачі кафедри читали спецкурси з новітніх напрямів фізики конденсованого стану, квантової оптики та квантової інформації, фізики високих енергій та інтегрованих квантових систем, квантової теорії поля, загальних проблем теоретичної фізики та проблематики наукових досліджень. Кафедра також приділяє значну увагу підготовці студентів-теоретиків до вступу в магістратуру КАУ.

Працівники кафедри спільно з Науково-освітнім центром ІТФ та із залученням інших кафедр КАУ організують щорічні школи з новітніх проблем теоретичної фізики для студентів та аспірантів, наукові семінари і лекції, влаштовують факультативи з фізики та математики для студентів 1-го і 2-го курсів фізичних та математичних факультетів київських університетів.

Зокрема, в 2024 році проведено такі заходи:

1. 11.04.2024 – 13.04.2024. KAU Data Science School: Topical Lectures on Machine Learning, Міжнародна студентська наукова школа що організована: ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України та Кафедрою теоретичної та математичної фізики КАУ, Інститутом математики НАН України та Кафедрою математики КАУ. Цикл лекцій «Topological Data Analysis for Cosmology», лектор Віталій Тимчишин, к.ф.-м.н., молодший науковий співробітник КАУ, молодший науковий співробітник ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України.

2. З 19.04.2024 в рамках виконання в КАУ міжнародного проєкту BOOSTalent були проведені онлайн два цикли лекцій «Контрольоване машинне навчання» (30 год., 1 кредит ECTS) та «Неконтрольоване машинне навчання» (30 год., 1 кредит ECTS). Лектор Віталій Тимчишин, к.ф.-м.н., молодший науковий співробітник КАУ, молодший науковий співробітник ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України.

3. 21.05.2024 – 23.05.2024. Студентська наукова школа-семінар «Комп'ютерна фізика ДНК». Організатори: ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України і Кафедра теоретичної та математичної фізики КАУ.

4. З 24.05.2024 в рамках виконання в КАУ міжнародного проекту BOOSTalent був проведений онлайн цикл лекцій "Manifold Learning" (15 год., 0,5 кредита ECTS). Лектор Віталій Тимчишин, к.ф.-м.н., молодший науковий співробітник КАУ, молодший науковий співробітник ІТФ ім. М.М. Боголюбова НАН України.

5. 20.02.2024 – 20.05.2024. Програма підтримки студентських та академічних науково-інноваційних проєктів КАУ, студентський проєкт "New Battery GENeration (NBG)", науковий керівник проєкту - Перепелиця Сергій Миколайович, завідувач Кафедрою ТМФ КАУ, директор ІТФ.

НАУКОВІ ПУБЛІКАЦІЇ

Монографії

1. Moskaliuk, S.S., Silenko, A. J. **Fundamentals of Quantum Theory of Neutron and Photon**, Series "Methods of Mathematical Modelling", 2024, vol. 16, 286 p., Kyiv: TIMPANI.
https://www.researchgate.net/publication/383234693_Fundamentals_of_Quantum_Theory_of_Neutron_and_Photon_-_MMM16

Статей в журналах – 134:

українських – 26, іноземних – 108.

КОНФЕРЕНЦІЇ ТА СЕМІНАРИ

- XIV Конференція молодих вчених "Проблеми теоретичної фізики", 16-18 січня 2024 р.
- 1й Міжнародний науковий семінар "Швеція – Україна", 6 лютого 2024 р.
- Семінар "Проблеми теоретичної фізики", присвячений пам'яті академіка Олексія Ситенка. Київ, 20 лютого 2024 р.
- 2й Міжнародний науковий семінар "Швеція – Україна", 2 квітня 2024 р.
- 3й Міжнародний науковий семінар "Швеція – Україна", 28 травня 2024 р.
- Науковий семінар пам'яті П.І. Фоміна "Квантова теорія поля та космологія". Київ, 2 липня 2024 р.

- 4й Міжнародний науковий семінар “Швеція – Україна”, 10 вересня 2024 р.
- Боголюбівська київська конференція «Проблеми теоретичної і математичної фізики», 24-26 вересня 2024 р.
- 5й Міжнародний науковий семінар “Швеція – Україна”, 3 грудня 2024 р.
- Другий австро-український семінар, 5 грудня 2024 р.
- ХХХ Давидівські читання з теоретичної фізики. Київ, 26 грудня 2024 р.

НАГОРОДИ ТА ВІДЗНАКИ ДЕРЖАВНІ НАГОРОДИ

Премія імені М.М. Боголюбова Національної академії наук України

В.І. Герасименко (Інститут математики Національної академії наук України), **В.П. Гусинін** (Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України), А.А. Дороговцев (Інститут математики НАН України) За цикл праць «Еволюційні рівняння та їх застосування у квантових і стохастичних системах»

Орден «За заслуги» III ступеня
академік НАН України Ю.І. Ізотов

Премія Верховної Ради України молодим ученим
к.ф.-м.н. А.В. Рудаковський, доктор філософії М.Д. Аджимамбетов

Відзнака НАН України «За професійні здобутки»
професор, д. ф-м.н. М.С. Гончар, с.н.с., д. ф-м.н. Ю.В. Штанов

Відзнака НАН України «За підготовку наукової зміни»
д. ф-м.н., с.н.с. О.К. Відибіда

Подяка Президії НАН України

к-ф.м. н., с.н.с. О.Д. Кочерга, В.П. Кухарук

Почесна Грамота Президії НАН України та ЦК профспілки

д. ф-м.н., с.н.с. Л.М. Христофоров, Т.Г. Бубон, А.Д. Кривошея,
О.В. Угрюмова

**Грамота Президії НАН України та Ради молодих вчених
НАН України**

доктор філософії М.Д. Аджимамбетов

Нагороди

**Інституту теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова
Національної академії наук України**

**Премія імені Олександра Давидова
Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України**

д. ф-м.н., с.н.с. О.К. Відибіда, д. ф-м.н., с.н.с. Л.М. Христофоров

**Премія імені Остапа Парасюка
Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України**

д. ф-м.н., с.н.с. М.З. Іоргов, д. ф-м.н., с.н.с. Т.В. Скрипник

**Премія імені Миколи Боголюбова для молодих вчених
Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова
Національної академії наук України**

доктор філософії Ю.С. Журавльов

DEPARTMENT OF HIGH-DENSITY ENERGY PHYSICS

Determining the presence and location of the QCD critical point (CP) is one of the main goals in relativistic heavy-ion collisions. Event-by-event fluctuations of the baryon number is the useful tool for solving this problem.

In this work, we analyze the system consisting of 400 classical non-relativistic particles interacting via the Lennard-Jones (LJ) potential:

$$V(\mathbf{r}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{\mathbf{r}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{\mathbf{r}} \right)^6 \right].$$

Parameters σ and ε define the repulsive core size and attractive well depth, respectively, setting the system's length and energy scales. The LJ equation of state has been extensively studied via molecular dynamics (MD). Its phase diagram includes a first-order liquid-gas transition with a CP in the 3D-Ising universality class, located at critical temperature $\tilde{T}_c = T_c / \varepsilon \cong 1.321$ and particle number density $\tilde{n}_c \sigma^3 \cong 0.316$ (see Figure, left graph). The MD simulations of the LJ system demonstrate strong CP fluctuation signals due to the particle interactions in the coordinate space. However, the real measurements in high energy physics are only possible in the momentum space where these fluctuations disappear because of an absence of particle interactions in the momentum space. We study this problem under experimental restrictions specific to heavy-ion collisions. In heavy-ion collisions, collective flow causes correlations between particle coordinates and momenta during the hydrodynamic stage of the system evolution. To explore this, we incorporate a longitudinal flow along collision axis into our simulations to study the fluctuations in a finite part of the momentum space.

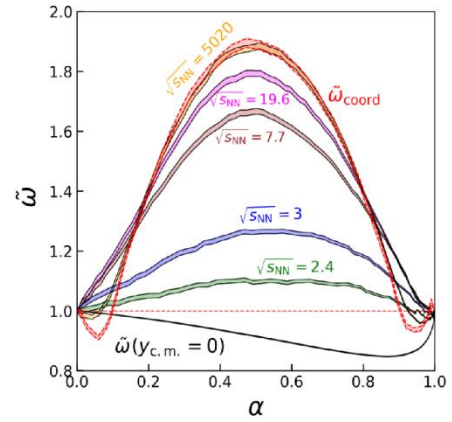
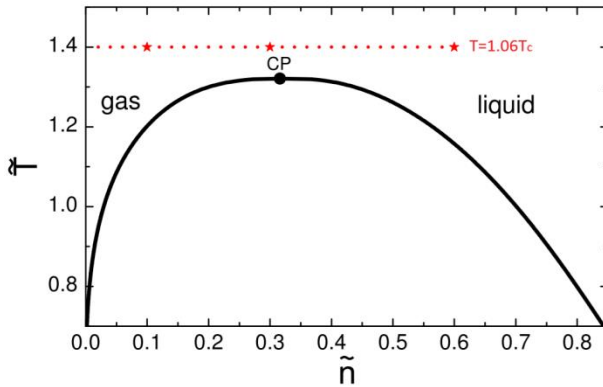
We run our MD simulations slightly above the CP at $T = 1.06 T_c$ and different particle number densities (see Figure, left graph). We examine the scaled variance of particle number distribution defined as

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{(1-\alpha)} \times \frac{\langle N_{\text{acc}}^2 \rangle - \langle N_{\text{acc}} \rangle^2}{\langle N_{\text{acc}} \rangle},$$

where $\alpha = \langle N_{\text{acc}} \rangle / N_0$, with N_{acc} is the number of accepted particles and $N_0=400$.

The plot on the right side of Figure shows the $\tilde{\omega}$ at $n = 0.95 n_c$ as a function of the fraction of particles included in our measurement window.

Different lines represent various center of mass collision energies per nucleon pair in GeV units, demonstrating that stronger flow at higher energies helps preserve fluctuation signals.



1. **Flow Matters:** Without collective flow, the fluctuation signals vanish in momentum space. With flow, these signals become detectable in experiments.
2. **Important energies and acceptances:** Our research suggests that the best energy range to look for the CP fluctuations is around $\sqrt{S_{NN}} \approx 3-7$ GeV, where the flow is strong enough to keep fluctuations alive without being overwhelmed by other effects. The fluctuation signals reach their maximum values at $\alpha \approx 0.5$, i.e. when a fraction of the detected particles is near 50% of their total value. (V.A. Kuznietsov, M.I. Gorenstein)

- Kuznietsov, V.A.; Gorenstein, M.I.; Koch, V.; Vovchenko, V., 2024. Coordinate versus momentum cuts and effects of collective flow on critical fluctuations. *Phys. Rev. C* **110**, 015206. [doi:10.1103/PhysRevC.110.015206](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.015206)

Within the realistic iHKM and LQTH models, the dependence of pion-pion femtoscopic radii on the pair transverse mass in the region of its lowest values (< 200 MeV/c) for central Pb+Pb collisions at the Large Hadron Collider was investigated. It was established that in both models the behavior of the radii in the region of ultralow momentum deviates from the power law typical for higher momentum values. Instead, it is possible to describe the dependence of the radii on the pair transverse velocity with a single formula for all corresponding pair momentum values. The unusual behavior for pions with ultralow momenta may indicate a kind of decoupling of such particles from the rest of the system and formation of a kind of “trap” for ultrasoft pions. (Yu.M. Sinyukov, V.M. Shapoval)

- Rzesa, W.; Kornakov, G.; Kisiel, A. R.; Sinyukov, Yu. M.; Shapoval, V. M., 2024. Femtoscopy analysis of ultrasoft pion trap at energies available at the CERN Large Hadron Collider. *Phys. Rev. C* **110**, 034904. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.034904>

In the t'Hooft-Veneziano limit of the three-dimensional effective Polyakov loop model the correlation functions of the Polyakov loops have been evaluated. This gave a chance to explore the mass spectrum of the SU(N) model at nonzero baryon chemical potential. This spectrum appears to be complex in general and leads to the exponential decay of the correlations modulated by an oscillating factor. (O.A. Borisenko, S.M. Voloshin)

- Borisenko, O.; Chelnokov, V.; Voloshin, S., 2024. The Polyakov loop models in the large N limit: Correlation function and screening masses. *Phys. Rev. D* **109**, 094503. doi.org/10.1103/PhysRevD.109.094503

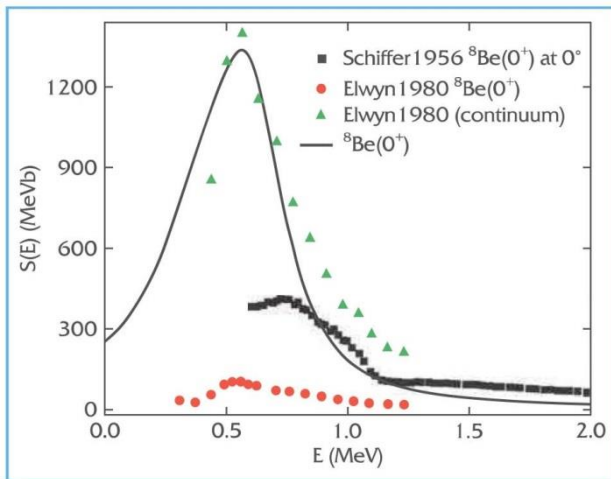
DEPARTMENT OF THEORY OF NUCLEI AND QUANTUM FIELD THEORY

It is known, that nuclei of light elements appeared in the first minutes after the Big Bang. This phenomenon is called primary nucleosynthesis. At the same time, although most predictions coincide with observations, there is a problem with lithium ${}^7\text{Li}$: it should be 3-4 times more than it actually contains in old stars.

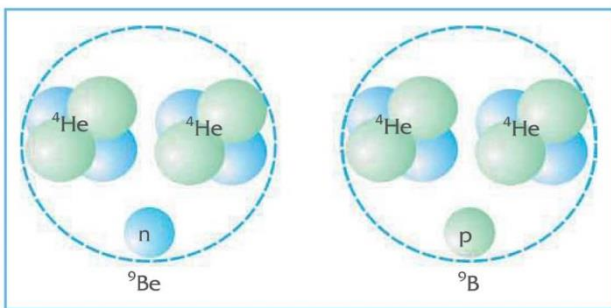
According to modern ideas, the main source of lithium ${}^7\text{Li}$ is beryllium ${}^7\text{Be}$, which, when capturing an electron, turns into ${}^7\text{Li}$. Reactions that destroy ${}^7\text{Be}$ can also reduce the amount of lithium. To understand these processes, nuclear reactions were studied at low energies – the range in which nuclear transformations occurred at the beginning of the Universe.

Collisions of deuterons with nuclei ${}^7\text{Be}$ and ${}^7\text{Li}$ were purposefully experimentally studied, which are interesting to theorists. A microscopic description of such reactions was carried out, that helped to reconcile theory with experiment and better understand the role of these processes in the formation of light elements.

Instead of the usual cross-sections of nuclear reactions, a method of using the astrophysical S-factors was proposed. They take into account the Coulomb barrier in the collision of particles of the same charge and simplify the comparison of theory with experiment. The astrophysical S-factors of the reactions of ${}^7\text{Be}$ and ${}^7\text{Li}$ nuclei with deuterons, obtained by the scientists of the institute, are in fairly good agreement with the



Розраховані й отримані з експериментальних даних S-фактори реакції ${}^6\text{Li} + {}^3\text{He} \rightarrow {}^8\text{Be} + p$



Структура компаунд-ядер бору ${}^9\text{B}$ та берилію ${}^9\text{Be}$, що утворюються на проміжній стадії реакцій ${}^6\text{Li} + {}^3\text{He}$ та ${}^6\text{Li} + {}^3\text{H}$, відповідно

available experimental data. In addition, they allow us to predict the behavior of these reactions in the energy range characteristic of the first minutes of the Universe's existence, when the primary nucleosynthesis of light nuclei took place.

The same theoretical approaches were used to analyze the reactions of lithium ${}^6\text{Li}$ with tritium ${}^3\text{H}$ or helium ${}^3\text{He}$. In these cases, measurement data are lacking, but theoretical predictions coincide with the available results. It turned out that the S-factors of ${}^6\text{Li}$ with ${}^3\text{H}$ and ${}^3\text{He}$ differ significantly due to the same Coulomb interaction and differences in the energies of the quantum states of the compound nuclei of beryllium ${}^9\text{Be}$ and boron ${}^9\text{B}$. However, due to

the lack of reliable experimental data, it is necessary to continue to make calculations, as they become practically the only reference point for future research. Such a research should be aimed at a more accurate determination of the distribution of ${}^6\text{Li}$ and ${}^7\text{Li}$ nuclei in the early Universe, and thus should bring the solution to the cosmological problem of lithium closer. (V.S. Vasilevsky, Yu.A. Lashko, V.I. Zhaba)

- Lashko, Yu. A., Vasilevsky, V.S., Zhaba, V. I., 2024. Theoretical analysis of the reactions induced by interaction of ${}^6\text{Li}$ with ${}^3\text{H}$ and ${}^3\text{He}$ nuclei. *Phys. Rev. C* **110**(3), 035806. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.035806>

Cross-sections of the photon bremsstrahlung in the scattering of protons off deuterons are calculated. The calculations are performed using two- and three-cluster models: the folding model, that neglects the Pauli principle, and the resonating group method, that accounts for it. The two- and three-cluster models employ different wave functions to describe the internal structure of the deuteron. This approach allowed us to examine the sensitivity of the cross-sections of photon bremsstrahlung to the specific characteristics of the deuteron wave function. The cross-sections were calculated over a wide energy range for the relative motion of protons and

deuterons, from 10 to 1000 MeV. Theoretical values show a good agreement with the available experimental data. It was demonstrated that the deuteron structure is significant at relatively low energies, but starting from 500 MeV the bremsstrahlung cross-sections become insensitive to the shape of the deuteron wave function. Additionally, the energy region of the final state of the proton-deuteron system, where the effects of the Pauli principle are prominent, was identified. (V.S. Vasilevsky)

- Shaulskyi, K. A., Maydanyuk, S. P., Vasilevsky, V. S., 2024. Study of structure of deuteron from analysis of bremsstrahlung emission in proton-deuteron scattering in cluster models. *Phys. Rev. C*, **110** (3), 034001. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.110.034001>

Within the framework of the canonical ensemble formalism and the mean-field model, the phase structure of a system of interacting relativistic bosons at nonzero temperatures and isospin (charge) densities has been investigated. It has been shown that in the presence of attraction between particles in such a system, a liquid–gas phase transition additionally occurs against the background of Bose–Einstein condensation. The reasons why the presence of a Bose condensate significantly increases the critical temperature of the liquid–gas phase transition in comparison with the temperature obtained for the same system within the Boltzmann statistics have been explained (V. Gnatovskyy, D. Zhuravel, D. Anchishkin)

- Gnatovskyy, V.; Anchishkin, D.; Zhuravel, D.; Karpenko V., 2024. Phase diagrams of a relativistic self-interacting boson system. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 560. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.560>

In the framework of quantum geometrodynamics, the generalized Einstein-Friedmann equation for a homogeneous and isotropic universe containing a new summand in the expression for the energy density is obtained. This summand is stipulated by the quantum Bohm potential and acts similarly to a stiff matter. It modifies the expansion history of the early universe and decays faster than radiation in late universe. (V.E. Kuzmichev, V.V. Kuzmichev)

- Kuzmichev, V.E.; Kuzmichev, V.V., 2024. The Hubble tension from the standpoint of quantum cosmology. *Eur. Phys. J. C* **84**, 121. <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-024-12490-6>

Equations for particles with spin $S = 0$ and $S = 1$ are presented in the form of a system of two Dirac equations with additional conditions (constraints) imposed on the components of the wave functions. In case of identical masses (or at the high-energy limit, where the difference in mass

is negligible), the joint system of equations is formulated having particular solutions coinciding with those for spin $S = 0$ and $S = 1$ cases, and simultaneously being the two Dirac equations for two independent particles with spin $S = 1/2$. (B. E. Grinyuk)

- Grinyuk, B.E., 2024. Equations for particles with spin $S = 0$ and $S = 1$ in spinor representation. *Ukr. J. Phys.* **69** (11), 889. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.11.889>

For a quantum quartic anharmonic oscillator, the main physical characteristics and properties are thoroughly studied and calculated on the basis of the expansion of the wave function of the system by the full set of eigenfunctions of a harmonic oscillator, i.e., by the basis of the eigenfunctions of an undisturbed Hamiltonian. The convergence of the calculated energy levels of the anharmonic oscillator is shown with respect to the number of basis functions included in the expansion, across a wide range of variations in the anharmonicity parameter. The energies of the ground and the first six excited states of the system are calculated in a very wide range of changes in the coupling constant of the oscillator. (V.A. Babenko, A.V. Nesterov)

- Babenko, V. A., Nesterov, A. V., 2024. The quartic anharmonic oscillator – an oscillator-basis expansion approach. I. Energy levels study and calculation. *Nuclear Physics and Atomic Energy* **25** (3), 216-227. <https://doi.org/10.15407/jnpae2024.03.216>

DEPARTMENT OF MATHEMATICAL METHODS IN THEORETICAL PHYSICS

Three linked Borromean rings are topologically associated, in particular, to certain molecular compounds, Efimov trimers of particles, and a kind of quantum entanglement. Mathematically, such a link is described by the commutation relations for the three parabolic generators of the fundamental group in the Wirtinger representation. They are usually implemented using two-by-two complex matrices from a special linear group that serves as the isometry group of the metric of the hyperbolic three-dimensional (half-)space in the Klein model. The specificity of the metric of this model is the lack of equivalence (isotropy) between the three coordinate axes, which complicates its application in physics problems in isotropic space. This problem is solved using the Poincaré ball model, whose parabolic isometries are naturally given by nonlinear Möbius transformations of coordinates, not by numerical matrices.

Such transformations are described in the first part of the work. On the other hand, the fundamental group (of transformations) is related to the symmetry of a three-dimensional body, namely, to the complement of the Borromean rings, which, according to W. Thurston, should consist of two regular hyperbolic octahedra of finite volume with cuspidal vertices at infinity (on the boundary sphere). Thus, by stabilizing three vertices of one of the octahedra, three parabolic generators (transformations) of the fundamental group are found. These are employed to construct a rhombic dodecahedron with a volume of two octahedra and thus to provide the complement with maximum symmetry.

We also consider a statistical model of directed random walk on a Cayley tree generated by the fundamental group of the Borromean rings and embedded in the Poincaré ball with a root point at the center. Such six-branched graphs can mimic dendritic polymers. We focus on the multifractal properties of the partition function defined for the truncated N -th generation tree and consisting of Boltzmann weights for discrete paths with moment order q , which plays the role of the inverse temperature in physics but takes both positive and negative values. Since the series of Boltzmann weights defined by the hyperbolic distance of order N between tree vertices does not exhibit multifractality, a functional with an “interaction” quadratic in N is used. It corresponds to the perimetric characteristic of the surface formed by adjacent triangles whose edges connect the root point and the two nearest tree vertices. Normal stochastization is revealed and multifractal indices for the partition function are numerically calculated. They indicate the absence of a dominant subset of paths and the necessity of considering all graphs, at least approximately, in the desired analytical description. Inasmuch as the behavior is determined by the central limit theorem for large N , the Markov chain approximation is used and the partition function (in the Gaussian approximation) is analytically calculated for relatively small absolute values of the moment q .

Besides, according to R. Penner, the Teichmüller space of a decorated ideal octahedral surface embedded in the Poincaré ball is constructed. In terms of the conformity of the decoration, six moduli and a mapping class group generated by cyclic permutations of vertices are designated. In order to quantize the geometric area, a connection between induced geometry and the sine-Gordon model is established. The latter correspondence is employed to obtain a differential two-form in the cotangent bundle is obtained. With the focus on a star-shaped body formed by ideal squares in

three orthogonal planes (of equatorial disks), quantum fluctuations of the body area are analyzed using the canonical quantization of the sine-Gordon model that leads to the Mathieu differential equation. Since quantum area fluctuations arise at the boundaries of geometric regions, according to the general predictions in quantum geometry, we associate them with the decoration of the cusps of the surface. Using the (single) quantum state generated by the Hamiltonian constraint, an indication of the presence of a gap in the area spectrum is obtained. (A.V. Nazarenko)

- Nazarenko, A.A.; Nazarenko, A.V., 2024. Structures associated with the Borromean rings' complement in the Poincare ball. *Ukr. J. Phys.* **69** (7), 498-514. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.7.498>

We have considered classical and quantum non-dynamical quadratic $abcd$ Lax algebras with classical and quantum $gl(n) \otimes gl(n)$ -valued $abcd$ -tensors satisfying a set of quadratic equations generalizing those of Fredel and Maillet. It was shown that the linearization of the obtained quadratic structures leads to linear tensor structures with the classical $gl(n) \otimes gl(n)$ -valued r -matrices satisfying generalized classical Yang-Baxter equations. An example of this construction associated with the deformed Z_n -graded r -matrix has been considered, and the corresponding $abcd$ -tensors, both classical and quantum, explicitly constructed. (T. Skrypnyk)

- Skrypnyk, T., 2024. On a new class of non-dynamical $ABCD$ algebras for classical and quantum integrable systems. *Nuclear Phys. B* **1008**, 116685. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysb.2024.116685>

DEPARTMENT OF ASTROPHYSICS AND ELEMENTARY PARTICLES

In gapped bilayer graphene, similarly to conventional semiconductors, Coulomb impurities (such as nitrogen donors) may determine the activation energy of its conductivity and provide low-temperature hopping conductivity. However, in spite of the importance of Coulomb impurities, nothing is known about their electron binding energy in the presence of gates. We studied the electron binding energy E_b of a singly charged donor in bilayer graphene with the top and bottom gates at distance d and gate-tunable gap Δ . We show that for $10 < d < 200$ nm and $1 < \Delta < 70$ meV the ratio E_b / Δ changes from 0.4 to 1.4. This ratio stays close to unity because of the dominating role of the bilayer polarization screening which

reduces the Coulomb potential well depth to values of gaps $\sim\Delta$. (V.P. Gusynin, E.V. Gorbar)

- Gorbar, E.V., Gusynin, V.P., Oriekhov, D.O., Shklovskii, B.I., 2024. Electron binding energy of donors in bilayer graphene with a gate-tunable gap. *Phys. Rev. B* **109**, 165145. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.165145>

Broad components, characteristic of explosive outflow of ionized matter, have been discovered in the emission line profiles of hydrogen and helium in two low-metallicity dwarf compact galaxies with active star formation. These galaxies have low masses of several million solar masses, low oxygen abundances of 0.1 and 0.05 solar abundances, high velocity dispersions of ~ 700 and ~ 1200 km/s, and high terminal velocities of the stellar wind of ~ 1000 and ~ 1000 – 1700 km/s, respectively. For the first galaxy, we succeeded in capturing an eruption phase by monitoring the variations of the broad-to-narrow component flux ratio. We observe a sharp increase of that ratio by a factor of 4 in 2017 and a decrease by about of an order of magnitude in 2023. The peak luminosity of the broad component in H α line lasted for about 6 yr out of a three-decades monitoring. This allows us to conclude that a star of the class of luminous blue variable (LBV) is likely found in the integral spectrum of this galaxy, which caused the eruption signs. The very high luminosity of H α broad component, close to values observed in active galactic nuclei and supernovae stars, and the variability of no more than 20 per cent of the broad-to-narrow flux ratio of the hydrogen and helium emission lines over a 8 yr monitoring do not allow us to definitively conclude that this galaxy contains an LBV. (Y.I. Izotov, N.G. Guseva)

- Guseva, N.G., Thuan, T.X., Izotov, Y.I., 2024. Monitoring broad emission-line components in spectra of the two low-metallicity dwarf compact star-forming galaxies SBS 1420+540 and J1444+4840. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **527** (2), 3932-3944. <https://doi.org/10.1093/mnras/stad3485>

We constructed a simple scale-invariant action coupling the Higgs field to the metric scalar curvature R and containing an R^2 term, that exhibits spontaneous breaking of scale invariance and electroweak symmetry. The coefficient of the R^2 term in this case determines the self-coupling of the Higgs boson, and the scalaron becomes a dilaton weakly coupled to the Higgs boson in the Einstein frame. Majorana mass terms for right-handed neutrinos can be obtained in a scale-invariant manner by using the Higgs-field invariant. In this case, the existing experimental limits on the Higgs-boson total width rule out Majorana mass values for

neutrino in the range between 10 and 60 GeV. The model inherits the naturalness issues of general relativity connected with the smallness of the gravitational and cosmological constants. (Y. Shtanov)

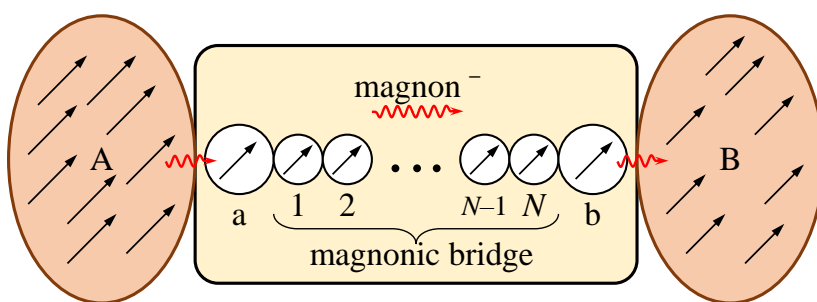
- Shtanov, Y., 2024. Electroweak symmetry breaking by gravity. *Journal of High Energy Physics* **02**, 221. [https://doi.org/10.1007/JHEP02\(2024\)221](https://doi.org/10.1007/JHEP02(2024)221)

It is well known that stationary solutions of the Gross-Pitaevski equation correspond to those states of the system for which almost all N atoms are in the condensate. We have shown that all stationary solutions of this equation, except for the ground state, are special: they correspond not only to the condensate of N atoms, but also to the condensate of N elementary quasiparticles. Moreover, such solutions are soliton-like. These results were obtained for a one-dimensional system of spinless point bosons with zero boundary conditions. (M.D. Tomchenko)

- Tomchenko, M., 2024. Nonuniform Bose–Einstein condensate: II. Doubly coherent states. *J. Phys. A: Math. Theor.* **57**, 495205. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ad9188>

DEPARTMENT OF THEORY OF QUANTUM PROCESSES IN NANOSYSTEMS

The development of quantum information technologies has shown that charged particles are not very suitable for transmitting information. This is due to the Joule heat that is released in the device during the transport of the charge. Therefore, uncharged carriers are most suitable for transmitting information over nanoscale distances.

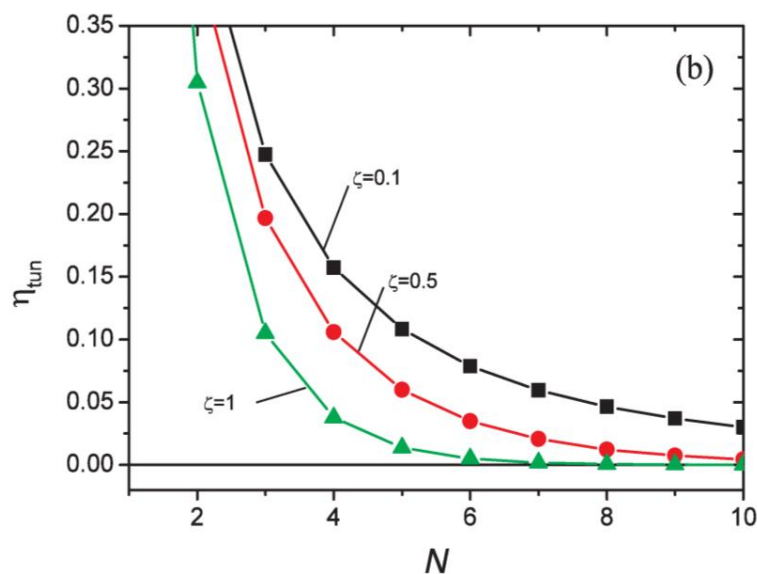


It is proposed to use spin excitations of ordered paramagnetic ions, so-called magnons. Since the motion of magnons can be controlled by both a

magnetic field (acting on the magnetic moment of the paramagnetic ion) and an electric field (through deformation of the crystal field of the ligands), this makes it possible to use magnons in quantum communications. It is also known that magnons interact quite well with phonons and photons – respectively, quanta of oscillations of atomic nuclei and quanta of the electromagnetic field. Based on this fact, it was possible to create hybrid devices that are microcavities with nanomagnets

inserted into them. In such hybrid photon-magnon resonators, electromagnetic oscillations occur with frequencies of the order of gigahertz and terahertz, which also corresponds to the excitation frequencies of static (Kitel's) magnons. It opens up wide opportunities to generate one type of excitation quanta into quanta of another type for the purpose of using hybrid photon-magnon resonators in quantum technology. In the work [E.G. Petrov. *J. Appl. Phys.* **156**, 134301 (2024)] a physical mechanism for implementing quantum communication between photon-magnon resonators is proposed, according to which magnons generated in the nanomagnet of one of the resonators (A or B) can be transferred to the other resonator through ferromagnetic nanoscale chains. It is shown that such transfer can be carried out in two ways, namely by sequential magnon hoppings along all units of the chain, as well as by magnon tunneling between its terminal units a and b (see Fig. 1).

An analytical dependence of the corresponding transfer rates on the number of paramagnetic bridge units N is revealed and a magnon analogue of the Seebeck and Peltier effects, which characterize the efficiency of



magnon quantum transfer, is presented.

Tunneling of magnons follows directly from the exponential decrease in the magnon transfer rate with increasing number of chain units (Fig. 2). Thus, the tunneling transport of magnons through bridging ferromagnetic structures indicates a specific coherent mechanism to implement

quantum communications using uncharged carriers.

- Petrov, E.G, 2024. Long-range magnon transfer across a bridging ferromagnetic chain via sequential and tunnel routes. *J. Appl. Phys.* **135** (1)3, 134301. <https://doi.org/10.1063/5.0197658>

The decisive role of the kinetics of transitions in photoactive molecular diodes in the formation of optoelectronic processes caused by the tunneling of electrons between the tip of the tunneling microscope and the fluorophore, as well as between the fluorophore and the metal

nanoelectrode was revealed. It is shown how this kinetics control both the current through the fluorophore and the electroluminescence of the fluorophore, including electrofluorochromy. (Corresponding member of NASU E.G. Petrov, O.L. Kapitanchuk, Ye.V. Shevchenko)

- Petrov, E., Kapitanchuk, O., Shevchenko, Ye., Gorbach, V., Lyubchik, A., 2024. Features of optoelectronic processes in a molecular junction based on a fluorophore with optically active frontier π -orbitals: electrofluorochromism in a ZnPc-based junction. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** (34), 22761-22774. <https://doi.org/10.1039/D4CP01328J>

Combining the results of DFT calculations together with STM experimental data on the structure of self-assembled monolayers of ferroelectric nematic-liquid-crystal DIO molecules adsorbed on the atomically flat Au(111) surface, a model of the packing of molecules in a monolayer was proposed to be characterized by a high degree of polar ordering of the molecules. (O. Kapitanchuk)

- Marchenko, A.A., Kapitanchuk, O.L., Lopatina, Ya.Yu., Nazarenko, K.G., Senenko, A.I., Katsonis, N.H., Nazarenko, V.G., Lavrentovich, O.D., 2024. Polar self-organization of ferroelectric nematic-liquid-crystal molecules on atomically flat Au(111) surface. *Phys. Rev. Lett.* **132** (9), 098101. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.132.098101>

The condition of resetting efficiency in search processes is derived. It shows that the resetting can be beneficial even under narrow distributions of first passage times (or, vice versa, cannot be under wide distributions). This is numerically checked for random walks in 1D lattices. For quantum walks, the system evolution and non-equilibrium steady state with localization around the resetting node is described; the mean and mean square displacement are calculated. (L.M. Christophorov)

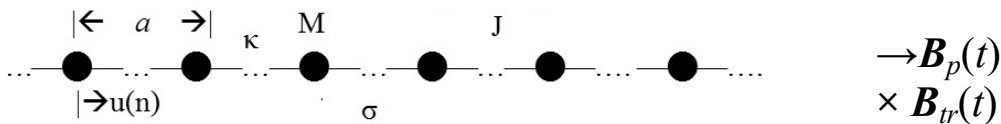
- Christophorov, L.N., 2024. Continuous time random walks with resetting in a bounded chain. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 591-599. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.591>

The localization of electrons in a double quantum system formed by a pair of quantum dots is studied. The energy spectrum and spectral distribution of localized/delocalized electrons are calculated. Both symmetric and asymmetric quantum wells are considered and their effects are compared. A charge qubit implemented on double quantum dots is presented. (S.P. Kruchinin)

- Filikhin, I., Karouia, A., Zatezalo, T., Kruchinin, S., Vlahovic, B., 2024. Effect of double quantum dot asymmetry on electron localization. *Modern Physics Letters B*, **38** (21), 2342005. <https://dx.doi.org/10.1142/S0217984923420058>

DEPARTMENT OF THEORY OF NONLINEAR PROCESSES IN CONDENSED MATTER

Solitons in low-dimensional molecular systems play a special role in the processes of energy and charge transport, since they are almost dissipative states. Such molecular systems include biological macromolecules, electrically conductive polymers, and new low-dimensional functional materials that are widely used in modern nanotechnologies. Such systems are shown schematically in Figure below. Here black circles represent unit cells of mass M , three dots are bonds between neighboring cells at equilibrium distance a , J is a resonant (exchange) interaction, κ is elasticity of a chain, σ is electron-phonon interaction coupling, which is the basis of soliton formation. Dimensionless electron-lattice interaction constant $g=\sigma^2/2J\kappa$ plays the key role in soliton properties and is the nonlinearity parameter of the nonlinear Schrödinger equation.



Molecular chain and parallel, and transversal magnetic field.

Solitons in biological systems and nanotechnology devices based on molecular systems can be exposed to external fields, including oscillating in time magnetic fields, that raises the question about effect of such fields on soliton properties. That is why soliton dynamics in oscillating in time magnetic field $\mathbf{B}(t)=\mathbf{B}_0\sin(\omega t)$ was investigated in our paper. For this purpose, we consider two cases when the field is both perpendicular and parallel to the chain axis, since in the case of an arbitrary field orientation, it can be represented in the form of such two components.

It is shown that in parallel magnetic field $B_p(t)$ soliton dynamics is a composition of a “free” soliton (soliton in the absence of the field) propagation along the chain and oscillating movement of a free electron in the perpendicular to chain plane. This movement is described by harmonic oscillator functions with the oscillation frequency ω_0 , proportional to the

magnetic field $B_p(t)$, and, thus, depending on field frequency ω . Electron cyclotron mass is determined by the transverse components of electron effective mass tensor.

In a transversal magnetic field $B_{tr}(t)$ soliton wave function is a composition of electron plane wave in the transversal plane and longitudinal wave function component which satisfies the modified nonlinear Schrödinger equation with the additional term that accounts for the effect of the magnetic field and is proportional to a small parameter. Smallness of this additional term allows to solve the equation using nonlinear perturbation theory based on the Inverse Scattering Method. According to this theory, soliton wave function has a standard form but with slow varying in time parameters in the general case. Calculations for our particular form of the perturbation show that soliton width and its amplitude are constant and don't depend on the magnetic field, while its velocity and phase are oscillating in time functions with the frequency of the main harmonic determined by the magnetic field frequency.

It is also shown that in the presence of the energy dissipation soliton velocity is bounded above due to balance of the energy absorbed by a soliton from the field and energy loss due to radiation of linear sound waves and energy dissipation. It is calculated soliton radiation which is emitted because of time depending soliton frequency, and is shown to be the most intensive at resonant frequency of the field which is proportional to nonlinearity parameter g of the nonlinear Schrödinger equation and sound frequency in the chain.

Such a complex effect of time-depending magnetic fields on charge transport, provided by solitons, can affect functioning of the devices based on low-dimensional molecular systems. These results also suggest the physical mechanism of the resonant therapeutic effects of oscillating magnetic fields as the resonant impact of the magnetic field on the dynamics of solitons which provide charge transport along biological macromolecules in the redox processes.

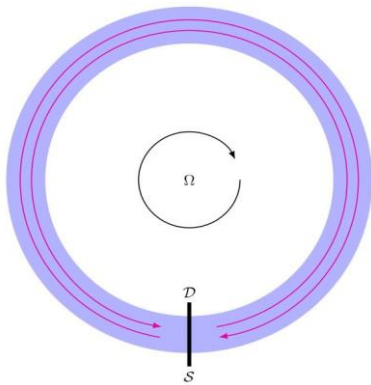
Obtained here results are important not only from the point of view of fundamental physics and biophysics, but are also important for experimental physics and modern technologies, as well as for understanding processes that take place in living organisms, and mechanisms of the external electromagnetic field effect on such systems. The latter is also important for the development of modern non-invasive therapeutic methods based on using time depending magnetic fields and

for understanding of the impact of such fields on ecosystems and electromagnetic pollution of environment. (L.S. Brizhik)

- Brizhik, L., 2024. Dynamics of the Davydov's soliton in external oscillating magnetic field. *Chaos, Solitons and Fractals* **187**, 115459.

<https://doi.org/10.1016/j.chaos.2024.115459>

The Sagnac effect refers to the phase shift between two coherent waves, such as light, traveling in opposite directions within an interferometer mounted on a rotating disk. This principle forms the foundation of various modern navigation systems. Notably, laser gyroscopes based on the Sagnac effect are extensively employed in high-precision military applications, including advanced weaponry.



Setup of the Sagnac experiment: Two light rays originate from a source (S) and travel in opposite directions along a circular path – one clockwise and the other counterclockwise. The platform, which contains both the light source and the screen for observing the interference, rotates in the clockwise direction. After completing a full rotation, the rays converge at the detector (D), where interference

occurs between them.

The magnitude of the phase shift is directly proportional to the area enclosed by the light rays, the frequency of the light, and the angular velocity of the interferometer's rotation.

Given that material particles also exhibit wave-like properties, the Sagnac effect has been experimentally observed in free electrons in vacuum, neutrons, and even atoms. Moreover, when the Sagnac effect is realized on electrons, the resulting phase shift in the interference pattern is roughly a million times larger than that for light, as the phase shift for material particles is proportional to their rest mass.

This prompted a theoretical question: how would the Sagnac effect manifest in solid-state interferometers using free electrons in monolayer graphene? Graphene is known for its zero effective carrier mass and linear electron dispersion, properties that closely resemble those of light.

In our study, we discovered that, despite these unique properties, the Sagnac effect in graphene is still governed by the mass of the free electron. As a result, the effect in graphene remains approximately a million times stronger than in light-based interferometers. The parameters of existing

graphene samples make the practical realization of the Sagnac effect in graphene feasible. Our research enhances the understanding of fundamental quantum principles in their application to rotating solid-state systems. (S.G. Sharapov, Y.V. Shtanov)

- Fesh, A.Yu., Shtanov, Yu.V., Sharapov, S.G., 2024. Sagnac effect in a rotating ring with Dirac fermions. *Phys. Rev. B* **110**, L121402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.110.L121402>

The molecular dynamics method was used to study anomalous bent conformations of natural polyamine molecules, specifically spermidine³⁺, interacting with the DNA double helix. The results showed that the anomalous bent conformations of spermidine³⁺ arise from interactions between all three polyamine amino groups and DNA phosphate groups on the minor groove side of the double helix. The changes in the torsion angles of the bent spermidine³⁺ molecule interpreted through conformational transformations of six- and seven-membered rings, analogous to those of cyclohexane and cycloheptane. Analysis of the spermidine³⁺ arrangement along the DNA macromolecule revealed sequence-specific binding, with a pronounced preference for A-tracts on the minor groove side. The formation of anomalous bent conformations of spermidine³⁺ in complex with the DNA double helix can play a crucial role in understanding the mechanisms underlying DNA's biological functions. (S.M. Perepelytsya)

- Perepelytsya, S., Vasiliu, T., Laaksonen, A., Engelbrecht, L., Mocci, F., 2024. Unusual bending patterns of spermidine³⁺ bound to DNA double helix, *Low Temperature Physics* **50**, 204–214. <https://doi.org/10.1063/10.0024969>

Electron transport through a molecular junction consisted of a single molecule coupled to macroscopic leads is studied within the nonequilibrium Green's function method in the antiadiabatic regime. The molecule is modelled as a d -fold degenerated energy level with strong electron-vibron interaction (EVI) and attractive electron-electron correlations which lift the degeneracy. In the molecule the strength of the EVI may be significant that leads to the attractive character of the electron-electron interaction. It was shown that in the case of the attractive interaction, the dependence of the level occupation on the bias voltage becomes nonlinear and transport properties of the system are changed significantly. The method of transport spectroscopy made it possible to determine through which levels (both ground and excited) tunneling

occurs, as well as the orientation of electron spins at these levels. (E.A. Ponezha)

- Ponezha, E.A., 2024. Electron transport through degenerate electron level in single-molecular junction in the presence of electron-vibrational coupling and attractive electron-electron correlations. *Low Temp. Phys.* **50** (5), 409. <https://doi.org/10.1063/10.0025624>

Radiation corrections, which remove accidental degeneracy in the spectrum of the relativistic hydrogen atom and lead to the modification of the Coulomb law, are calculated within the novel approach, based on the exact solution of the Dirac equation with the Coulomb potential. The energy spectrum of the hydrogen atom is obtained with account of these corrections and the Lamb shift is calculated for the lowest energy states. (V.M. Loktev, L.S. Brizhik, A.A. Eremko)

- Eremko, A.A., Brizhik, L.S., Loktev, V.M., 2024. To the theory of the Lamb shift in the relativistic hydrogen atom. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 537. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.537>

The fluxon motion in an array of Josephson junctions with a non-sinusoidal current-phase dependence is investigated. The equation of fluxon motion in such an array with a dipole spatial impurity is obtained. The fluxon dynamics is modeled, and the possibility of the coexistence of fluxons with different equilibrium velocities for the exact value of the external current is shown. The influence of the second harmonic of the current-phase dependence on the sensitivity of fluxon dynamics to initial conditions is analyzed. It was shown that changing the polarity of the inhomogeneity significantly affects the mobility and dynamics of the fluxon. The threshold current of fluxon pinning on the impurity is calculated. The dependence of threshold current on the amplitude of the impurity, discreteness, and dissipation in the array is constructed with the help of numerical calculations. (I.O. Starodub, Y.O. Zolotaryuk)

- Starodub, I.O., Zolotaryuk, Y., 2024. Discreteness effects on the fluxon interaction with the dipole impurity in the Josephson transmission line. *Physics Letters A* **503**, 129414. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2024.129414>

The novel nonlinear integrable system of parametrically driven pseudo-excitations on a regular two-leg ladder lattice has been developed. The time dependencies of system's inter-site coupling parameters are consistently defined in terms of the accompanying parametric driver formalized by the set of four homogeneous ordinary linear differential

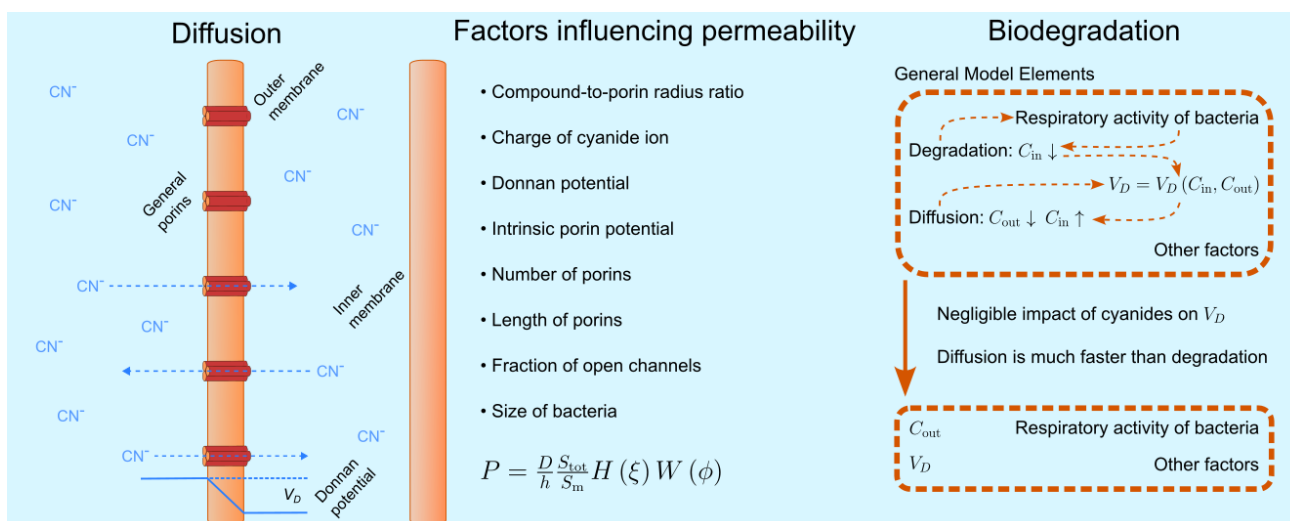
equations with the time-dependent coefficients. The physically meaningful version of suggested parametrically driven nonlinear dynamical system permits the concise Hamiltonian formulation specified by two pairs of canonically conjugated field amplitudes. (O.O. Vakhnenko).

- Vakhnenko, O.O., Vakhnenko, V.O., 2024. Development and analysis of novel integrable nonlinear dynamical systems on quasi-one-dimensional lattices. Parametrically driven nonlinear system of pseudo-excitations on a two-leg ladder lattice. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 577–590. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.577>

The exact solution is presented of the tight-binding eigenvalue problem for conjugated oligomers (polyparaphenylene and polynaphthalene (PN) of different lengths), which can serve as building blocks for armchair and $(2m,m)$ graphene nanoribbons. We show that the electron spectrum of polynaphthalene includes the local states unlike the spectrum of polyparaphenylene consisting (as well as spectra of armchair graphene nanoribbons of arbitrary widths) only of extended states. Explicit analytic expressions for the wave functions of the conjugated oligomers are given. (L.I. Malysheva)

- Malysheva, L., 2024. Electronic structure of conjugated oligomers that are building blocks for achiral and chiral graphene nanoribbons. *Chem. Phys. Lett.* **836**, 141048. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2023.141048>

DEPARTMENT OF SYNERGETICS



This research addresses one of the most pressing environmental challenges faced by modern industry – the contamination of water resources by cyanide compounds. Every year, industries such as gold mining and jewelry manufacturing produce billions of liters of cyanide-

contaminated wastewater, posing severe risks to both human health and the environment. While various treatment methods exist, biological treatment using bacteria has emerged as the most promising solution due to its cost-effectiveness and environmental friendliness.

This research explains the detailed mechanisms of cyanide transport through bacterial membranes – a critical step that determines how effectively bacteria can remove these compounds from contaminated water. This understanding is essential for developing more effective methods of water purification from cyanide contamination.

The significance of this work is highlighted by several key achievements:

1. A complete mathematical model has been created that accurately describes how different types of cyanide compounds move through bacterial membranes. This allows us to predict which bacteria will be most effective for water treatment and under what conditions they will work best.
2. The research explains why some types of cyanide compounds are more easily processed by bacteria than others. This understanding is crucial for improving industrial water treatment processes.
3. The developed theoretical framework allows to determine optimal conditions for bacterial treatment of cyanide-contaminated water, potentially leading to significant improvements in treatment efficiency and cost reduction.

The practical significance of this work is particularly noteworthy for countries with extensive mining industries, where cyanide contamination of water resources is a serious environmental concern. Current findings provide a scientific basis for developing more efficient and environmentally friendly methods of water treatment, potentially leading to significant cost savings in industrial water purification processes. (V. Yakovliev, academician of NAS of Ukraine B.I. Lev)

- Yakovliev, V., Lev, B., 2024. Impact of bacterial outer membrane and general porins on cyanide diffusion and biodegradation kinetics. *J. Hazard. Mater.* **480**, 136117. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2024.136117>

The advantages of describing the geometric nature of the physical properties of the early universe using the Clifford algebra approach are demonstrated. A geometric representation of the wave function of the early universe is used, and a new mechanism of spontaneous symmetry breaking

with different degrees of freedom is proposed. A possible supersymmetry is revealed, and it is shown that the energy of the initial vacuum can be considered equal to zero. The origin of baryonic asymmetry and the nature of dark matter can be explained using a geometric representation of the wave function of the early universe. (academician of NAS of Ukraine B.I. Lev)

- Lev, B., 2024. Application of Clifford's Algebra to Describe the Early Universe. *Mathematics* **12**, 3396. <https://doi.org/10.3390/math12213396>

The Fokker–Planck equation is formulated for the distribution functions of macroscopic open systems in the space of slowly changing physical variables (energy, adiabatic invariants, etc.). The stationary solution of such equations determines a quasi-equilibrium distribution function in the relevant space. The proposed approach involves the evolution of systems under the action of dissipation and diffusion in the space of the appropriate variables. It is shown that the well-known power law distribution can be obtained by considering internal and external fluctuations in statistical systems. (academician of NAS of Ukraine B.I. Lev, academician of NAS of Ukraine A.G. Zagorodny)

- Lev, B., Zagorodny, A., 2024. Fluctuations and power law distribution function in nonequilibrium systems. *Ukr. J. Phys.* **69** (8), 519–527. <https://doi.org/10.15407/ujpe69.8.519>

Nonclassicality is a fundamental concept in quantum optics. A nonclassical state of light is a state that cannot be presented as a statistical mixture of coherent states. The motivation behind this definition is that coherent states are considered to be classical since they can be described by classical electrodynamics. Nonclassical states can exhibit properties that are unattainable for their classical counterparts like sub-Poissonian statistics or quadrature squeezing.

However, not every measurement can reveal nonclassicality of a state. In some experiments, the measurement statistics of a nonclassical state can be simulated by a mixture of coherent states. We call such statistics classical. Conversely, if measurement statistics cannot be simulated by a mixture of coherent states, it is nonclassical and the underlying state is necessarily nonclassical one.

Detecting nonclassicality of measurement statistics is a nontrivial task. Let us suppose that the measurement involves only photocounting with N outcomes. The problem of determining whether statistics obtained from such an experiment is classical is equivalent to determining whether a

point in an N -dimensional space lies within the convex hull of a curve, which represents classical statistics in the experiment. A general approach to this problem involves determining a set of inequalities, which are similar to Bell inequalities. Statistics is classical if and only if for any N -dimensional vector the associated Bell-like inequality is satisfied. The downside of this approach is that considering all possible inequalities becomes less feasible as N increases.

However, there is no need to consider the entire set of Bell-like inequalities. For each experiment, there is a subset of inequalities such that if they are satisfied, all other inequalities hold as well. These inequalities are called tight. In our paper, we formalized this statement and used it to derive tight inequalities for photocounting experiments with realistic photodetectors.

We used the obtained tight inequalities to reveal nonclassicality of photocounting statistics of a phase-squeezed coherent state. The importance of this result is tied to the fact that it was widely believed that such statistics is classical.

To conclude, we derived tight inequalities for testing photocounting statistics obtained with an arbitrary detector. Such inequalities significantly reduce the complexity of nonclassicality tests and were used to reveal nonclassicality of photocounting statistics of a phase-squeezed coherent state. (V.S. Kovtoniuk, E.V. Stolyarov, A.O. Semenov)

- Kovtoniuk, V. S., Stolyarov, E. V., Kliushnichenko, O. V., Semenov, A. A., 2024. Tight inequalities for nonclassicality of measurement statistics. *Phys. Rev. A* **109**, 053710. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.013701>

A general formula for the photocounting probability distribution in Gaussian Boson Sampling (GBS) schemes with arbitrary detectors has been derived. GBS is a model of nonuniversal quantum computation that claims to demonstrate quantum supremacy with current technologies. It is shown that shortcomings of realistic photodetection techniques, such as dead time, significantly affect the results of quantum computations. Validation methods of GBS have been tailored for the case of using non-ideal detectors. (I.S. Eremenko, M.A. Dmytruk, A.O. Semenov)

- Yeremenko, I.S., Dmytruk, M. A., Semenov, A. A., 2024. Realistic photon-number resolution in Gaussian boson sampling. *Phys. Rev. A* **110**, 043715. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.110.043715>

The time coherence of quantum-light pulses propagating through a turbulent atmosphere was determined using numerical simulations. This enabled the identification of time intervals during which emblematic quantum properties are preserved. In particular, we have found time characteristics for the preservation of both discrete- and continuous-variable entanglement, as well as for the preservation of optical nonclassicality. (M. Klen, A.O. Semenov)

- Klen, M., Vasylyev, D., Vogel, W., Semenov, A. A., 2024. Time correlations in atmospheric quantum channels. *Phys. Rev. A* **109**, 033712.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.033712>.

The necessary and sufficient conditions are established under which the economic system, described by the “input-output” production model, is functioning in the mode of sustainable development. A complete description of the equilibrium states for which markets are partially cleared in the economy model of production “input-output” is given, on the basis that all solutions of system of linear equations and inequalities are completely described. The existence of a family of taxation vectors and restrictions for these vectors in the “input-output” model of production under which the economic system is able to function in the mode of sustainable development is proved. (M.S. Gonchar)

- Gonchar, N.S, 2024. Economy function in the mode of sustainable development. *Advances in Pure Mathematics* **14**, 242-282.
<https://doi.org/10.4236/apm.2024.144015>

DEPARTMENT OF COMPUTER MAINTENANCE

The most important result of the project “Implementation of the DataverseUA Open Data Repository and Development of Services to Ensure Reliable Operation. Section 1. Introduction into Industrial Operation of the DataverseUA Open Data Repository of the NAS of Ukraine and Ensuring the Placement and Storage of Scientific Data” is the preparation and introduction into industrial operation of the DataverseUA Open Data Repository of the NAS of Ukraine. The DataverseUA Repository provides open access for users to the information stored in it, in particular to research datasets and other related files in electronic form, placed on open access terms, through the official web portal of the DataverseUA Repository at the link: <https://opendata.nas.gov.ua/>. The Regulations of the NAS of Ukraine Open Data Repository have been developed which are the main regulatory documents for the operation of

the DataverseUA Repository. The Regulations determine the procedure for the operation of the DataverseUA Repository, the procedure for filling it with datasets, storing them, systematizing them, and making information publicly available. An auxiliary website was developed and put into operation to process applications from users of the NAS of Ukraine for placing research data in the DataverseUA Repository and contains the necessary methodological materials for users. The research datasets of NAS employees placed in the DataverseUA Repository receive a unique DOI identifier, which allows searching and reuse of research data while preserving the copyright of the dataset provider. (S.Ya. Svistunov, P.V. Svirin, Y.V. Gonchar, V.V. Pelykh)

DEPARTMENT OF THEORETICAL AND MATHEMATICAL PHYSICS

Department of Theoretical and Mathematical Physics (TMP) of Kyiv Academic University (KAU) at the Bogolyubov Institute of Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine (BITP) provides education and training of masters in the scientific and educational program “Theoretical and Mathematical Physics”. In particular, the lecturers of the department have taught special courses in the latest areas of condensed matter physics, quantum optics and quantum information, high-energy physics and integrated quantum systems, quantum field theory, general problems of theoretical physics and issues of scientific research. The department staff also pays considerable attention to the preparation of theoretical physics students for admission to the master’s program of the KAU.

The staff of the TMP Department, together with the Scientific and Educational Center of the BITP and other departments of the KAU, organize annual schools on the latest problems of theoretical physics as well as scientific seminars and lectures for undergraduate and graduate students, and read elective courses in physics and mathematics for 1st and 2nd year students of the physics and mathematics faculties of Kyiv universities.

In particular, the following events were held in 2024:

1. 11.04.2024 – 13.04.2024. Lecture series “Thematic lectures on machine learning” (online). Lecturer: Vitaliy Tymchyshyn, Ph.D., Junior Researcher of the KAU, Junior Researcher of the BITP.

2. 19.04.2024. Lectures courses “Supervised machine learning” (online) and “Unsupervised machine learning” (online). Lecturer: Vitaliy Tymchyshyn, Ph.D., Junior Researcher of the KAU, Junior Researcher of the BITP.

3. 21.05.2024 – 23.05.2024. Student Scientific School-Seminar “Computational Physics of DNA”. Organizers: Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine and the Department of Theoretical and Mathematical Physics, KAU.

4. 24.05.2024 as a part of the implementation in KAU of the international project BOOSTalent an online series of lectures "Manifold Learning" was held. Lecturer: Vitaliy Tymchyshyn, Ph.D., Junior Researcher of the KAU, Junior Researcher of the BITP.

5. 20.02.2024 – 20.05.2024. Program for supporting student and academic scientific and innovative projects of KAU, student project "New Battery GENERation (NBG)", scientific director of the project - Perepelytsya S.M., Head of the TMP Department of KAU, Director of the BITP.

SCIENTIFIC PUBLICATIONS

Monographs

1. Moskaliuk, S.S., Silenko, A. J. **Fundamentals of Quantum Theory of Neutron and Photon**, Series “Methods of Mathematical Modelling”, 2024, vol. 16. – 286 p. – Kyiv: TIMPANI. https://www.researchgate.net/publication/383234693_Fundamentals_of_Quantum_Theory_of_Neutron_and_Photon_-_MMM16

Papers in Journals: 134:

Ukrainian journals – 26, International journals – 108.

CONFERENCES & SEMINARS

- XIV Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics”. Kyiv, January 16-18, 2024
- 1st International Scientific Seminar “Sweden-Ukraine”. Kyiv, February 6, 2024

- Seminar “Problems of Theoretical Physics”, dedicated to the memory of Academician Oleksiy Sytenko. Kyiv, February 20, 2024
- 2nd International Scientific Seminar “Sweden-Ukraine”, Kyiv, April 2, 2024
- 3rd International Scientific Seminar “Sweden-Ukraine”, Kyiv, May 28, 2024
- Scientific Seminar in Memory of P.I. Fomin “Quantum Field Theory and Cosmology”, Kyiv, July 2, 2024
- 4th International Scientific Seminar “Sweden-Ukraine”, Kyiv, September 10, 2024
- Bogolyubov Kyiv Conference “Problems of Theoretical and Mathematical Physics”, Kyiv, September 24-26, 2024
- 5th International Scientific Seminar “Sweden-Ukraine”, Kyiv, December 3, 2024
- Second Austro-Ukrainian Seminar, Kyiv, December 5, 2024
- XXX Davydov Readings in Theoretical Physics, Kyiv, December 26, 2024

PRIZES AND AWARDS

STATE AWARDS

M.M. Bogolyubov Prize of the National Academy of Sciences of Ukraine

V.I. Gerasimenko (Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Ukraine), **V.P. Gusynin** (Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine), A.A. Dorogovtsev (Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Ukraine) for the series of works “Evolutionary equations and their applications in quantum and stochastic systems”

Order “For Merit” of the 3rd degree
Academician of the National Academy of Sciences of Ukraine
Yu.I. Izotov

Prize of the Verkhovna Rada of Ukraine to young scientists

A.V. Rudakovskiy, M.D. Adzhymambetov

Honor “For professional achievements”

Professor, Doctor of Physics and Mathematics M.S. Gonchar,
Senior Researcher, Doctor of Physics and Mathematics Yu.V. Shtanov

Honor “For the training of young scientists”

Doctor of Physics and Mathematics, Senior Researcher O.K. Vidybida

**Thanks from the Presidium
of the National Academy of Sciences of Ukraine**

O.D. Kocherga, V.P. Kuharuk

**Honorary Diploma from the Presidium of the National Academy
of Sciences of Ukraine and the Trade Union Central Committee**

L.M. Christophorov, T.G. Bubon, A.D. Kryvosheya,
O.V. Ugryumova

**Diploma from the Presidium of the National Academy of Sciences
of Ukraine and the Young Scientists Council
of the National Academy of Sciences of Ukraine**

M.D. Adzhymambetov

AWARDS

**of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine**

Olexandr Davydov Prize

**of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine**

Doctor of Physics and Mathematics, Senior Researcher O.K. Vidybida,
Doctor of Physics and Mathematics, Senior Researcher
L.M. Christophorov

Ostap Parasyuk Prize

**of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine**

Doctor of Physics and Mathematics, Senior Researcher M.Z. Iorgov,
Doctor of Physics and Mathematics, Senior Researcher T.V. Skrypnyk

**Mykola Bogolyubov Prize for Young Scientists
of the Bogolyubov Institute for Theoretical Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine**

Doctor of Philosophy Yu.S. Zhuravlev

Редактори
З.І. Вахненко, І.О. Стародуб