

JOINT INSTITUTE FOR NUCLEAR RESEARCH  
BOGOLIUBOV LABORATORY OF THEORETICAL PHYSICS

# MODERN PROBLEMS OF CONDENSED MATTER THEORY

**International Conference**

*Dubna, October 17-22, 2022*

Book of Abstracts

Dubna • 2022

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ  
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

# СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ТЕОРИИ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

Международная Конференция

*Дубна, Октябрь 17-22, 2022*

Сборник Аннотаций

Дубна • 2022



## Программный Комитет

А.М. Поволоцкий	ОИЯИ, Дубна
Е. Аницаш	ОИЯИ, Дубна
Д.Н. Аристов	ПИЯФ НИЦ КИ, СПбГУ, Санкт-Петербург
М.М. Глазов	ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
О.В. Кибис	НГТУ, Новосибирск
Е.А. Кочетов	ОИЯИ, Дубна
Ю.М. Письмак	СПбГУ, Санкт-Петербург
А.В. Рожков	ИТПЭ, Москва
П.Б. Сорокин	НИТУ МИСиС, Москва
А.К. Щекин	СПбГУ, Санкт-Петербург

## Организационный Комитет

В.А. Осипов	—сопредседатель
М. Гнатич	—сопредседатель
В.Л. Катков	—ученый секретарь
Е.Н. Русакович	—секретарь
Г.А. Калагов	
К.В. Куликов	
Н.М. Лебедев	
Л. Мижишин	
Ю.Г. Молотков	
О.Г. Садыкова	

## CONTENTS

- 1 *G.O. Abdullaev, Z.Z. Alisultanov*  
**SLOW OSCILLATIONS IN LAYERED WEYL SEMIMETALS**
- 2 *E.V. Aksenova, A.K. Shchekin, A.E. Kuchma*  
**EFFECTS OF SOLUTION VISCOSITY ON THE GROWTH RATE OF OVERCRITICAL GAS BUBBLES**
- 3 *З.З. Алисултанов*  
**НЕЭРМИТОВЫ ВЕЙЛЕВСКИЕ ФЕРМИОНЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**
- 4 *A.Yu. Cherny, E.M. Anitas, V.A. Osipov*  
**DENSE RANDOM PACKING WITH A POWER-LAW SIZE DISTRIBUTION: THE STRUCTURE FACTOR, MASS-RADIUS RELATION, AND PAIR DISTRIBUTION FUNCTION**
- 5 *N.V. Antonov, A.A. Babakin, P.I. Kakin*  
**STRONGLY NONLINEAR DIFFUSION IN TURBULENT ENVIRONMENT: A PROBLEM WITH INFINITELY MANY COUPLINGS**
- 6 *I.V. Baramygina, R.A. Niyazov, D.N. Aristov*  
**RKKY INTERACTION IN 2D WEYL SEMIMETAL MODEL WITH SPIN-ORBIT COUPLING**
- 7 *Т.А. Белгибаев*  
**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИМПУЛЬСА ТОКА НА ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЕ В  $\phi_0$  - ПЕРЕХОДЕ**
- 8 *P.A. Belov, N.Yu. Reshetikhin*  
**NUMERICAL MODELING OF THE CORRELATION FUNCTIONS IN THE SIX-VERTEX MODEL**
- 9 *С. С. Гаврилов*  
**СПОНТАННОЕ НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ В НЕРАВНОВЕСНОМ КОНДЕНСАТЕ ДВУМЕРНЫХ ЭКСИТОННЫХ ПОЛЯРИТОНОВ**
- 11 *Б.Н. Галимзянов, М.А. Доронина, А.В. Мокшин*  
**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СПЛАВЕ  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**
- 12 *Л.Ц. Аджемян, М. Гнатич, Э.В. Иванова, М.В. Компаниец, Т. Лучивяньски, Л. Мужичин*  
**ТРЕХПЕТЛЕВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ В МОДЕЛИ НАПРАВЛЕННОЙ ПЕРКОЛЯЦИИ**

- 13 *L.A. Gosteva, A.K. Shchekin*  
**STABLE DROPLETS AND BUBBLES WITHIN THE  
FUNDAMENTAL MEASURE DFT**
- 14 *П.Д. Григорьев, Р. Рамазашвили, М.В. Карцовник*  
**ЗЕЕМАНОВСКОЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙ-  
СТВИЕ И ЭФФЕКТИВНЫЙ G-ФАКТОР ЭЛЕКТРОНОВ,  
НАБЛЮДАЕМЫЙ ИЗ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ В  
АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ И СВЕРХПРО-  
ВОДНИКАХ**
- 15 *V.S. Gurin*  
**SIMULATION OF CdSe NANOPATELETS THROUGH THE  
DFT CLUSTER CALCULATIONS**
- 16 *А.В. Гурская, М.В. Долгополов, В.И. Чепурнов, Г.В. Пузырная*  
**РАДИАЦИОННОЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В БЕТА-  
ПЕОБРАЗОВАТЕЛЕ НА КАРБИДЕ КРЕМНИЯ**
- 17 *А.А. Дмитриев, Д.В. Пермяков, М.В. Рыбин, А.К. Самусев*  
**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НОРМАЛЬНЫХ МОД  
ДИМЕРА НАНОЦИЛИНДРОВ**
- 19 *А.А. Молодцова, А.Д. Розенблит, А.А. Дмитриев, В.А. Порватов,  
М.К. Бузаков, В.А. Смирнов, Д.В. Сенникова, О.И. Бурмистров,  
Е.М. Пухтина, А. Суслов3, и Н.А. Олехно*  
**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СКОПЛЕНИЯХ  
ДВИЖУЩИХСЯ РОБОТОВ**
- 21 *А.В. Гурская, М.В. Долгополов, С.А. Раджапов*  
**МАСШТАБИРОВАНИЕ НАНОЧИПОВ-ГЕНЕРАТОРОВ  
ДЛЯ БЕТАВОЛЬТАИКИ**
- 22 *Ю.А. Ерошкин, Л.Ц. Аджемян, А.К. Щёкин*  
**РАЗВИТИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕ-  
СКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ МИЦЕЛЛЯРНЫХ СИСТЕМ**
- 23 *К.А. Kazarnovskii*  
**THERMALIZATION WITH NON-ZERO INITIAL  
ANOMALOUS QUANTUM AVERAGES**
- 24 *N.V. Antonov, P.I. Kakin, N.M. Lebedev, A.Yu. Luchin*  
**RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS OF A  
SELF-ORGANIZED CRITICAL SYSTEM: INTRINSIC  
ANISOTROPY VS RANDOM ENVIRONMENT**

- 25 *G. Kalagov*  
ON THE HYDRODYNAMIC STIRRING OF A SCALAR  
FIELD
- 26 *D.G. Kvashnin, E.V. Sukhanova, Z.I. Popov*  
HYBRID ORGANIC/INORGANIC NANOSTRUCTURES  
FOR SPINTRONICS AND PHOTONICS
- 27 *M. Hnatič, M. Kecer, T. Lučivjanský*  
INFLUENCE OF RANDOM VELOCITY FIELD ON THE  
ANOMALOUS KINETICS OF A MULTI-SPECIES  
REACTION-DIFFUSION SYSTEM
- 28 *K.K. Kesharpu, E.A. Kochetov*  
SPIN-FLIP INDUCED SUPERFLUIDITY IN A RING OF  
HARD-CORE BOSONS
- 29 *M.V. Komarova*  
CONVERGENT PERTURBATION THEORY FOR  $\phi^4$  AND  
QED IN STRONG COUPLING LIMIT
- 30 *В.Н. Кондратьев*  
КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ КАПЕЛЬ  
ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА
- 31 *В.Н. Кондратьев*  
ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК МЕЖДУ  
СУПЕРПАРАМАГНИТАМИ
- 32 *S. Teber, A.V. Kotikov*  
FIELD THEORETIC RENORMALIZATION STUDY OF  
INTERACTION CORRECTIONS TO THE UNIVERSAL  
CONDUCTIVITY OF GRAPHENE
- 33 *S.E. Krasavin*  
ELECTRICAL RESISTIVITY OF POLYCRYSTALLINE  
GRAPHENE: EFFECT OF GRAIN-BOUNDARY-INDUCED  
STRAIN FIELDS
- 34 *А. Кудлис, И. Иорш, И. Токачлы*  
МОДЕЛИРОВАНИЕ СПОНТАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В  
РАМКАХ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКОЙ  
ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ПРИ  
ПОМОЩИ ТЕОРИИ ОПТИМИЗИРОВАННОГО  
ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

- 36 *K.V. Kulikov, M. Nashaat, M. Sameh, D.V. Anghel, Yu.M. Shukrinov*  
**RESONANCE PHENOMENA IN NANOMAGNET +  
JOSEPHSON JUNCTION SYSTEM UNDER EXTERNAL  
PERIODIC DRIVE**
- 37 *N.M. Lebedev*  
**FUNCTIONAL RENORMALIZATION GROUP IN THE  
HIGHLY NONLINEAR MODEL OF A GROWING PHASE  
BOUNDARY**
- 38 *И.С. Лобанов, В.М. Уздин*  
**ОБУЧЕНИЕ МАГНИТНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ В ПРИ-  
СУТСТВИИ СЛУЧАЙНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ**
- 39 *A.A. Mazanik, I.R. Rahmonov, A.E. Botha, Yu.M. Shukrinov*  
**MAGNETIZATION DYNAMICS SIGNATURE ON IV  
CURVES OF OVERDAMPED S/F/S JOSEPHSON  
JUNCTION**
- 40 *P.A. Maksimov, A.V. Ushakov, Z.V. Pchelkina, Y. Li, S.M. Winter,  
S.V. Streltsov*  
**AB INITIO GUIDED MINIMAL MODEL FOR THE  
“KITAEV” MATERIAL  $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ : IMPORTANCE OF  
DIRECT HOPPING, THIRD-NEIGHBOR EXCHANGE  
AND QUANTUM FLUCTUATIONS**
- 41 *В.Н. Марачевский*  
**ЭФФЕКТ КАЗИМИРА ДЛЯ ДИФРАКЦИОННЫХ  
РЕШЕТОК И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ**
- 43 *Y.B. Martynov, R.G. Nazmitdinov, R. Pujol-Nadal, F. Bonnin-Ripoll*  
**ON THE EFFICIENCY OF THE THIN FILM PEROVSKITE  
SOLAR CELLS**
- 44 *V.S. Melezhik*  
**QUANTUM-QUASICLASSICAL APPROACH FOR  
FEW-BODY PROBLEMS IN PHYSICS**
- 46 *D. Davletbaeva, M. Hnatič, M.V. Komarova, T. Lučivjanský,  
L. Mižišin, M.Yu. Nalimov*  
**RENORMALIZATION ANALYSIS OF THE VISCOSITY  
COEFFICIENT ON THE VICINITY OF SUPERFLUID  
PHASE TRANSITION**
- 47 *Т.И. Могильюк, П.Д. Григорьев*  
**МАГНИТНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ВНУТРИ-  
СЛОЕВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ  
МЕТАЛЛАХ**

- 48 Ю.Г. Молотков, Ю. Хонконен, М.Ю. Налимов, М.В. Комарова, А. Треногин  
**КРИТИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА  
В СВЕРХТЕКУЧЕЕ СОСТОЯНИЕ**
- 49 Б.С. Монозон, Т.А. Федорова, П. Шмельхер  
**МЕЖПОДЗОННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ  
В КРЕСЕЛЬНОЙ ЛЕНТЕ ГРАФЕНА В ПОЛЕ  
БИХРОМАТИЧЕСКОЙ СВЕТОВОЙ ВОЛНЫ**
- 50 А.Э. Мясникова, С.В. Доронкина, Р.Р. Арутюнян, А.Х. Джантемиров  
**ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА КУПАТНЫХ СВЕРХ-  
ПРОВОДНИКОВ, СФОРМИРОВАННАЯ КОРРЕЛЯЦИ-  
ЯМИ НОСИТЕЛЕЙ, ОПОСРЕДОВАННЫМИ КРИСТАЛ-  
ЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ**
- 51 Р.Г. Назмитдинов, К.Н. Пичугин  
**СПИНОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В ЛАТЕРАЛЬНОЙ КВАНТО-  
ВОЙ ТОЧКЕ**
- 52 M. Yu Nalimov  
**THE DIFFERENCE BETWEEN THE QUANTUM FIELD  
THEORY METHODS APPLICATION IN THE STATISTICAL  
PHYSICS AND PARTICLE PHYSICS**
- 53 Z.A. Narzikulov, T. Abdurakhmonov, A. Rakhimov  
**STRONG REPULSIVE INTERSPECIES INTERACTION  
EFFECTS IN TWO-COMPONENT BOSE MIXTURE**
- 54 M. Nashaat, K.V. Kulikov, Yu.M. Shukrinov  
**MANIPULATION OF MAGNETIC MOMENT DYNAMICS  
IN NANOMAGNET COUPLED TO JOSEPHSON JUNCTION**
- 55 Н.А. Небогатикова, И.В. Антонова, А.К. Гутаковский, Д.В. Смоваж  
**НАНОСТРУКТУРЫ В ОБЛУЧЕННЫХ ПЛЕНКАХ ПОД-  
ВЕШЕННОГО CVD-МУЛЬТИГРАФЕНА**
- 56 R.A. Niyazov, D.N. Aristov, V.Yu. Kachorovskii  
**MAGNETICALLY CONTROLLED HELICAL CRYSTALS**
- 57 R.A. Niyazov, I.V. Krainov, D.N. Aristov, V.Yu. Kachorovskii  
**SHOT NOISE IN AHARONOV-BOHM INTERFEROMETERS**

- 58 *M. Yu. Nalimov, A. V. Ovsiannikov*  
**RENORMALIZATION GROUP DESCRIPTION OF THE  
HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTING PHASE  
TRANSITION**
- 59 *A.R. Oganov*  
**NOVEL METHODS FOR PREDICTING EXOTIC  
COMPOUNDS AND NEW MATERIALS**
- 60 *G. Gori, V.V. Papoyan (Jr.), V.V. Papoyan, A. Trombettoni, N. Ananikian*  
**LOGARITHMIC NEGATIVITY IN THE 1D ANTI-  
FERROMAGNETIC SPIN 1 HEISENBERG MODEL WITH  
SINGLE-ION ANISOTROPY**
- 61 *П.Л. Пех*  
**ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭЛЕКТРОННО-  
ДЫРОЧНАЯ ЖИДКОСТЬ В МОНОСЛОЯХ  
ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ**
- 62 *Ю.М. Письмак*  
**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАНТОВАН-  
НЫХ ПОЛЕЙ С ПРОТЯЖЕННЫМ МАТЕРИАЛЬНЫМ  
ОБЪЕКТОМ**
- 63 *N.M. Plakida, A.A. Vladimirov, D. Ihle*  
**SUPERCONDUCTIVITY OF STRONGLY CORRELATED  
ELECTRONS ON THE HONEYCOMB LATTICE**
- 65 *М.Н. Поткина, И.С. Лобанов, В.М. Уздин*  
**КОЛЛАПС, НУКЛЕАЦИЯ И ВРЕМЕНА ЖИЗНИ СКИР-  
МИОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АНТИ-  
ФЕРРОМАГНЕТИКАХ**
- 66 *А.В. Рожков*  
**КОНКУРЕНЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОД-  
НЫХ СОСТОЯНИЙ В ФЕРМИОННЫХ СИСТЕМАХ**
- 67 *Д.С. Рошаль, К.К. Федоренко, М. Мартин, С. Багдигян,  
С.Б. Рошаль*  
**СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ  
СТРОЕНИЯ КЛЕТОЧНЫХ МОНОСЛОЕВ С РАЗНОЙ  
СКОРОСТЬЮ ДЕЛЕНИЯ**
- 68 *В.Н. Рыжов, Е.А. Гайдук, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок*  
**САМООРГАНИЗАЦИЯ ДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДНЫХ  
СИСТЕМ – РОЛЬ ТРАНСЛЯЦИОННОГО И ОРИЕНТА-  
ЦИОННОГО ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА**

- 69 *Н.Е. Савицкая, Т.А. Федорова*  
**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛИ ДИНАМИКИ МНЕНИЙ ДЛЯ МУЛЬТИАГЕНТНОЙ СИСТЕМЫ СО СТОХАСТИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИЕЙ СВЯЗЕЙ**
- 70 *В.Н. Марачевский, А.А. Сидельников*  
**НОВЫЙ КАЛИБРОВОЧНО-ИНВАРИАНТНЫЙ МЕТОД В ТЕОРИИ ЭФФЕКТА КАЗИМИРА**
- 71 *A.J. Silenko*  
**FOLDY-WOUTHUYSEN TRANSFORMATION AND MULTI-WAVE STATES OF A GRAPHENE ELECTRON IN EXTERNAL FIELDS AND FREE (2+1)-SPACE**
- 72 *A.O. Sorokin*  
**INTERACTION OF DOMAIN WALLS AND VORTICES IN THE TWO-DIMENSIONAL O(2) AND O(3) PRINCIPAL CHIRAL MODELS**
- 73 *L.Yu. Sorokina, L.A. Varlamova<sup>1</sup>, P.B. Sorokin*  
**THEORETICAL INVESTIGATION OF THE OXIDIZED BORON NITRIDE STABILITY**
- 74 *A.V. Syromyatnikov*  
**NEW SHORT-WAVELENGTH SPIN EXCITATIONS IN NON-COLLINEAR SPIN-1/2 ANTIFERROMAGNETS**
- 76 *И.С. Терехов*  
**АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ИНДУЦИРОВАННОГО ЗАРЯДА В ДИНАМИКАХ ПЕРЕХОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ**
- 77 *V.E. Timofeev, D.N. Aristov*  
**MAGNON BAND STRUCTURE OF SKYRMION CRYSTALS AND STEREOGRAPHIC PROJECTION APPROACH**
- 78 *N. Kolganov, D.A. Trunin*  
**CLASSICAL AND QUANTUM CHAOS IN NONLINEAR VECTOR MECHANICS**
- 79 *N.V. Antonov, M.M. Tumakova*  
**A GENERAL VECTOR FIELD COUPLED TO A STRONGLY COMPRESSIBLE TURBULENT FLOW**
- 80 *В.М. Уздин, И.С. Лобанов*  
**ИЕРАРХИЯ МАСШТАБОВ В ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ХИРАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ И ПРОБЛЕМА УСТОЙЧИВОСТИ СОСТОЯНИЙ**



- 81 *A.B. Mokshin, I.I. Fayruшин*  
САМОСОГЛАСОВАННАЯ РЕЛАКСАЦИОННАЯ  
ТЕОРИЯ КОЛЛЕКТИВНОЙ ДИНАМИКИ  
НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ
- 82 *Д.В. Чалин*  
ТЕОРИЯ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ДВУСЛОЙНОГО ГРА-  
ФЕНА И НАНОТРУБОК И МЕЖ-ТРУБОЧНЫЕ ОПТИ-  
ЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ
- 83 *L.A. Chernozatonskii, K.P. Katin, A.I. Kochaev, M.M. Maslov*  
Sp<sup>3</sup>-HYBRIDIZED FILMS BASED ON HEXAGONAL  
NITRIDE BILAYERS: DFT STUDIES OF STRUCTURES  
AND PROPERTIES
- 85 *A.Yu. Cherny*  
TAN'S ADIABATIC SWEEP THEOREM FROM THE  
VARIATIONAL THEOREM FOR THE SCATTERING  
LENGTH AND ITS GENERALIZATIONS
- 86 *Л.С. Чумакова, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова*  
АДСОРБЦИЯ КИСЛОРОДА НА ЛЕГИРОВАННОЙ  
ПОВЕРХНОСТИ Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>
- 87 *Ю.М. Шукринов*  
АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА
- 88 *А.К. Щёкин*  
РАСКЛИНИВАЮЩЕЕ ДАВЛЕНИЕ И ТЕРМОДИНАМИ-  
ЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ КАПЕЛЕК И ПУЗЫРЬКОВ
- 89 *N. Chtchelkatchev, R. Ryltsev*  
STRUCTURAL INHERITANCE AND MACHINE LEARNING  
FOR MATERIALS DESIGN: FROM STUDY OF LIQUID TO  
PREDICTION CRYSTALS
- 90 *V.I. Yukalov, E.P. Yukalova*  
REGULATING SPIN DYNAMICS OF MAGNETIC  
NANOMATERIALS
- 91 *E.I. Yuryeva*  
THE COMPUTER MODELLING OF SUPERCONDUCTING  
TRANSITION TEMPERATURE FOR YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-d</sub> USING  
THE TOPOLOGICAL ELECTRON MOTION EFFECTS

92 *V.Yu. Yushankhai, L.A. Siurakshina*

**QUANTUM-CHEMICAL CLUSTER CALCULATION IN  
MODEL OF QUANTUM MAGNETISM WITH STRONG  
SPIN-ORBIT INTERACTION**

## **SLOW OSCILLATIONS IN LAYERED WEYL SEMIMETALS**

**G.O. Abdullaev<sup>1</sup>, Z.Z. Alisultanov<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Amirkhanov institute of physics, DFRC, RAS, Makhachkala, Russia*

*Email: abd.gm90@yandex.ru*

In this work we consider the quantum oscillation of magnetization and conductivity in multilayer topological insulators in the presence of magnetic impurities. This system is a simple example of 3-d Weyl semimetals [1]. The special shape of the Fermi surface leads to the beating form of oscillation and the temperature coefficient depends on the chemical potential  $\mu$  which caused by linear dispersion law. In contrast for magnetization, for conductivity there appears additional terms, the so-called slow oscillation term, which were observed in layered structures with the usual dispersion law. Also, for Weyl semimetals there are terms with new characteristic frequency. This frequency is associated with the shift of the Dirac cones caused by symmetry breaking and is determined by the distance between Weyl points.

This work was supported by the Russian Science Foundation grant 22-72-00110

### **References**

- [1] A. A. Burkov, L. Balents, Physical review letters 107, 127 (2011). [2] P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B **67**, 144401 (2003).  
[2] P. D. Grigoriev, Phys. Rev. B **67**, 144401 (2003).

## EFFECTS OF SOLUTION VISCOSITY ON THE GROWTH RATE OF OVERCRITICAL GAS BUBBLES

**E.V. Aksenova<sup>1</sup>, A.K. Shchekin<sup>1</sup>, A.E. Kuchma<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia  
e.aksenova@spbu.ru, www.spbu.ru*

An analytical and numerical study of diffusion growth of overcritical gas bubbles at degassing of the supersaturated-by-gas solution with the explicit full-scale influence of viscous forces on internal pressure in the bubbles has been presented. At degassing of supersaturated-by-gas solution, we need to describe not only the dependence of the gas bubble growth rate on the bubble radius and gas supersaturation, but also control how the capillary and viscous effects change the concentration profile of the dissolved gas in supersaturated liquid solution around the growing bubble [1]. Using the approach, presented in [2] we have found how the growth rate of overcritical bubbles depends on gas supersaturation, its diffusivity and solubility in solution, solution viscosity, and surface tension at bubble surface.

We have derived analytical formulas for the bubble growth rate and the correction function (which takes into account the balance in the number of gas molecules that have left the liquid solution and came into the growing bubble) of small overcritical gas bubbles at strong viscosity of the solution and full account of capillary pressure in the bubbles as a function of the bubble radius. We have found the asymptotic formulas for the case of low viscosity and small radius. Finally, we obtained the formulas for the bubble growth rate and the correction function at large overcritical radius.

We numerically evaluated the effects of viscous forces on the rate of gas bubble growth at any radius of the overcritical bubble within the wide range of viscosities of the supersaturated-by-gas solution and confirm all the asymptotic analytical results.

### **References**

- [1] C.E. Brennen *Cavitation and Bubble Dynamics*. University Press, Oxford, (1995).

## НЕЭРМИТОВЫ ВЕЙЛЕВСКИЕ ФЕРМИОНЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

З.З. Алисултанов

*Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия*  
*zaur0102@gmail.com*

Мы развиваем неэрмитов гамильтонов формализм для описания фермионов Вейля типов III и IV, предложенных в работе [1]. Спектр гамильтониана имеет необычный тип анизотропии. А именно, эрмитовость гамильтониана сильно зависит от направления в импульсном пространстве: для одних направлений спектр вещественный, в отличие от других направлений, где он становится комплексным. Этот факт приводит к нетривиальной адиабатической эволюции и нетривиальным особенностям числа Черна. Кроме того, мы показываем, что неэрмитов гамильтониан может быть получен в рамках одночастичной задачи топологической зонной теории. Мы исследовали устойчивость неэрмитовых точек Вейля. Некоторые наши результаты могут быть применены и к другим бесцелевым неэрмитовым электронным состояниям.

Работа поддержана грантом РФФИ 22-72-00110.

### Список литературы

- [1] Nissinen, J. and Volovik, G. E., JETP Lett. 105 442 (2017)
- [2] Z.Z. Alisultanov, E.G. Idrisov, Towards the theory of types III and IV non-Hermitian Weyl fermions, arXiv:2110.13714

**DENSE RANDOM PACKING WITH A POWER-LAW SIZE  
DISTRIBUTION: THE STRUCTURE FACTOR,  
MASS-RADIUS RELATION, AND PAIR DISTRIBUTION FUNCTION**

**A. Yu. Cherny<sup>1</sup>, E. M. Anitas<sup>1,2</sup>, and V. A. Osipov<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation*

<sup>2</sup>*National Institute for Physics and Nuclear Engineering “Horia Hulubei”,*

*Bucharest-Magurele, Romania,*

*E-mail: anitas@theor.jinr.ru*

We consider dense random packing of disks with a power-law distribution of radii and investigate their correlation properties. We study the corresponding structure factor, mass-radius relation and pair distribution function of the disk centers. A toy model of dense segments in one dimension (1d) is solved exactly. It is shown theoretically in 1d and numerically in 1d and 2d that such packing exhibits fractal properties. It is found that the exponent of the power-law distribution and the fractal dimension coincide. An approximate relation for the structure factor in arbitrary dimension is derived, which can be used as a fitting formula in small-angle scattering. The findings can be useful for understanding microstructural properties of various systems like ultra-high performance concrete, high-internal-phase ratio emulsions or biological systems.

**References**

- [1] A Yu. Cherny, E. M. Anitas, and V. A. Osipov, *Dense random packing with a power-law size distribution: the structure factor, mass-radius relation, and pair distribution function*. <https://arxiv.org/pdf/2204.10644.pdf> (2022)

**STRONGLY NONLINEAR DIFFUSION IN TURBULENT ENVIRONMENT:  
A PROBLEM WITH INFINITELY MANY COUPLINGS**

**N.V. Antonov<sup>1,2</sup>, A.A. Babakin<sup>1</sup>, P.I. Kakin<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Department of Physics, Saint Petersburg State University, Universitetskaya nab.  
7/9, 199034 St. Petersburg, Russia*

<sup>2</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear  
Research, Dubna, Moscow Region, Russian Federation*

*E-mail: [n.antonov@spbu.ru](mailto:n.antonov@spbu.ru)*

The field theoretic renormalization group is applied to the strongly nonlinear stochastic advection-diffusion equation. The turbulent advection is modelled by the Kazantsev–Kraichnan “rapid-change” ensemble. As a requirement of the renormalizability, the model necessarily involves infinite number of coupling constants (“charges”). The one-loop counterterm is calculated explicitly. The corresponding renormalization group equation demonstrates existence of a pair of two-dimensional surfaces of fixed points in the infinite-dimensional parameter space. If the surfaces contain infrared attractive regions, the problem allows for the large-scale, long-time scaling behaviour. For the first surface (advection is irrelevant), the critical dimensions of the scalar field, the response field and the frequency are nonuniversal (through the dependence on the effective couplings) but satisfy certain exact identities. For the second surface (advection is relevant), the dimensions are universal and they are found exactly

**References**

- [1] N.V. Antonov, A.A. Babakin and P.I. Kakin, *Strongly Nonlinear Diffusion in Turbulent Environment: A Problem with Infinitely Many Couplings*. Universe, Vol. 8, pages 121-136 (2022)

## RKKY INTERACTION IN 2D WEYL SEMIMETAL MODEL WITH SPIN-ORBIT COUPLING

**I.V. Baramygina**<sup>1,2</sup>, **R.A. Niyazov**<sup>2,1</sup>, **D.N. Aristov**<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> NRC “Kurchatov Institute” - PNPI, Gatchina, Russia

<sup>2</sup> Department of Physics, St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

yulia.baramygina@gmail.com

The RKKY interaction plays an important role in studying the properties of systems with localized spins. It is usually considered as an effective exchange interaction between two magnetic impurities in a non-magnetic host material. This type of interaction is characterized by the oscillations with a frequency of  $2k_F$  ( $k_F$  is the Fermi momentum), at zero temperature the interaction decreases in a power-law manner  $R^{-d}$  ( $d$  is a dimensionality) [1]. In recent years, the RKKY interaction in such promising materials as Weyl and Dirac semimetals has been actively studied. Due to the unique spectrum of these materials, the RKKY interaction there differs from that in other systems. Oscillations appear associated with the location of the Weyl or Dirac points in the reciprocal space. As the effective Fermi momentum tends to zero, a higher degree of decrease with distance is observed.

We consider the RKKY interaction in the two-dimensional model of the Dirac semimetal proposed by S.M. Young and C.L. Kane [2]. This is the simplest model of a 2D Dirac semimetal where highly symmetric points exist in the presence of spin-orbit coupling. We have obtained analytical expressions for the RKKY interaction Hamiltonian in the proposed model. The distance dependence in the leading order agrees with the results for other two-dimensional systems. Both types of oscillations described above are present. As the Fermi momentum tends to zero, the RKKY interaction decreases with distance as  $R^{-3}$ . The same degree of decrease is observed when studying this phenomenon in pure graphene [3]. The presence of spin-orbit interaction leads to the magnetic anisotropy of the crystal. The tensor structure of the magnetic susceptibility corresponds to the pseudo-dipole interaction. In addition, there is an increase in the interaction along some directions.

We also study the problem of the influence of an external in-plane magnetic field. Such a perturbation leads to the splitting of each Dirac point into a couple of Weyl points. The presence of a magnetic field does not affect the general form of the RKKY interaction. Only the character of the spatial anisotropy changes. Moreover, oscillations appear with a period related to the amplitude of the magnetic field.

### **References**

- [1] D.N. Aristov *Indirect RKKY interaction in any dimensionality*. Phys. Rev. B, **55**, 8064 (1997)
- [2] S.M. Young and C.L. Kane *Dirac Semimetals in Two Dimensions*. Phys. Rev. Lett., **115**, 126803 (2015)
- [3] E. Kogan *RKKY interaction in graphene*. Phys. Rev. B, **84**, 115119 (2011)



## ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИМПУЛЬСА ТОКА НА ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЕ В $\varphi_0$ - ПЕРЕХОДЕ

Т.А. Белгибаев

*ЛТФ ОИЯИ, Дубна, Россия*

*belgibaev@theor.jinr.ru*

Мы исследовали динамику намагничивания под действием импульса тока в  $\varphi_0$  - переходе с прямой связью между магнитным моментом и сверхпроводящим током. Рассмотрено соответствие между величиной намагниченности в конце импульса  $m_z^*$  и реализацией перемагничивания вдоль легкой оси ферромагнетика. С целью выбора оптимального прямоугольного импульса сигнала, для элемента памяти, было исследовано влияние ширины и амплитуды сигнала на переключение намагниченности. Показаны интервалы параметров прямоугольного импульса тока относительно которых переключение остается устойчивым. Также, исследовано влияние разных форм импульса тока и их вклад на переключение, на основании которых выбрана оптимальная форма. Найдено минимальное значение импульса тока, при котором происходит переворот.

# NUMERICAL MODELING OF THE CORRELATION FUNCTIONS IN THE SIX-VERTEX MODEL

**P.A. Belov<sup>1</sup> and N.Yu. Reshetikhin<sup>2,3,4</sup>**

<sup>1</sup>*Spin Optics Laboratory, Saint-Petersburg State University, 198504 Russia*

<sup>2</sup>*Department of Mathematics, University of California, Berkeley,  
CA, 94720, USA*

<sup>3</sup>*Faculty of Physics, Saint-Petersburg State University, 198504 Russia*

<sup>4</sup>*Yau Mathematical Science Center, Tsinghua University,  
Beijing, 100084, China  
pavelbelov@gmail.com*

We study numerically the one-point and two-point correlation functions [1] of the height functions in the six-vertex model with domain wall boundary conditions. The height functions and the correlation functions are calculated by the Markov chain Monte-Carlo algorithm. Particular attention is paid to the free fermionic point ( $\Delta = 0$ ), for which the correlation functions are obtained analytically in the thermodynamic limit. A good agreement of the exact and numerical results for the free fermionic point allows us to extend calculations to the disordered ( $|\Delta| < 1$ ) phase and to monitor the logarithm-like behavior of the two-point correlation functions there. For the antiferroelectric ( $\Delta < -1$ ) phase, the exponential decrease of the two-point correlation functions is observed.

The presented work is supported by the Russian Science Foundation, grant 21-11-00141.

## References

- [1] P. Belov and N. Reshetikhin, *The two-point correlation function in the six-vertex model* J. Phys. A: Math. Theor. **55**, 155001 (2022)

# СПОНТАННОЕ НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ В НЕРАВНОВЕСНОМ КОНДЕНСАТЕ ДВУМЕРНЫХ ЭКСИТОННЫХ ПОЛЯРИТОНОВ

С. С. Гаврилов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики твердого тела им Ю. А. Осипьяна РАН,  
г. Черноголовка, 142432, Россия*

*gavr\_ss@issp.ac.ru*

В докладе обсуждается возможность спонтанного образования темных солитонов и вихрей в макроскопически когерентной системе двумерных поляритонов (смешанных экситон-фотонных мод), возбуждаемых плоской электромагнитной волной. Вакуумные состояния системы представляют собой плоские волны с частотой внешнего поля. Поскольку эта частота не связана с амплитудой конденсата, но выступает как отдельный параметр, спектры элементарных возбуждений довольно разнообразны. Боголюбовский спектр возбуждений характерен только для одного из многих возможных состояний системы, несмотря на то что парное взаимодействие между частицами имеет обычный характер отталкивания в разреженном газе. С увеличением амплитуды конденсата мнимая часть энергии возбуждений может изменять знак, что равносильно потере устойчивости данного однородного состояния [1].

Ключевая идея состоит в том, что для спинорного конденсата вакуумные состояния могут распадаться на домены с противоположными спинами  $\pm 1$  (они соответствуют право- и левоциркулярной поляризации света) или противоположными фазами. В первом случае образуются периодические “спиновые решетки”, обладающие дальним порядком [1, 2], а во втором — топологические возбуждения, связанные с инверсией фазы на границе между доменами [3]. Подчеркнем, что спиновые и фазовые домены, солитоны и вихри возникают даже тогда, когда система в своем начальном состоянии полностью однородна, симметрична по спину и возбуждается такой же однородной и симметричной световой волной. Еще один вариант установления равновесия после распада вакуумного состояния заключается в переходе к спиновым автоколебаниям [4].

## Литература

- [1] С. С. Гаврилов, УФН **190**, 137 (2020)

- [2] S. S. Gavrilov, Phys. Rev. Lett. **120**, 033901 (2018)
- [3] S. S. Gavrilov, Phys. Rev. B **102**, 104307 (2020)
- [4] S. S. Gavrilov, Phys. Rev. B **106**, 045304 (2022)

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СПЛАВЕ $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$ ПРИ СВЕРХВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Б.Н. Галимзянов, М.А. Доронина, А.В. Мокшин

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

*bulatgnmail@gmail.com*

Бинарный сплав  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  обладает ярко выраженной способностью образовывать объемное металлическое стекло, что делает его привлекательным для изготовления конструкционных материалов [1]. Функциональные свойства этого сплава зависят от термодинамических условий, в которых синтезируется и/или используется сплав. Поэтому для правильного определения функциональных возможностей этого сплава необходимо знать детальную ( $p$ ,  $T$ ) фазовую диаграмму.

В настоящей работе на основе данных молекулярно-динамических расчетов впервые определена ( $p$ ,  $T$ ) фазовая диаграмма сплава  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  для широкого термодинамического диапазона. Определены температура ликвидуса  $T_l$  и температура стеклования  $T_g$  как функции давления  $p$ . Мы показали, что полученные зависимости  $T_l(p)$  и  $T_g(p)$  воспроизводятся известными эмпирическими уравнениями Симона-Глатцеля. Выявлена область фазового расслоения, которая наблюдается при давлениях выше  $1 \cdot 10^7$  атм. В этой области Nb находится в жидком состоянии, в то время как Ni образует перколяционную кристаллическую структуру. Этот результат имеет важное значение, так как показывает, что давление является одним из основных термодинамических параметров, позволяющих управлять фазовыми превращениями в сплаве  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  [2]. Поэтому результаты настоящей работы могут стать отправной точкой для изучения фазовых переходов в системе Ni-Nb с различной концентрацией атомов Ni.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №19-12-00022-П). АВМ выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики «Базис» (№ 20-1-2-38-1).

### References

- [1] L. Xia, W.H. Li, S.S.Fang, B.C. Wei, Y.D. Dong *Binary Ni–Nb bulk metallic glasses*. J. Appl. Phys., **99**, 026103 (2006)
- [2] B.N. Galimzyanov, M.A. Doronina, A.V. Mokshin *Excellent glass former  $\text{Ni}_{62}\text{Nb}_{38}$  crystallizing under combined shear and ultra-high pressure*. J. Non-Cryst. Solids, **572**, 121102 (2021)

**ТРЕХПЕТЛЕВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКИХ  
ИНДЕКСОВ В МОДЕЛИ НАПРАВЛЕННОЙ  
ПЕРКОЛЯЦИИ.**

**Л. Ц. Аджемян<sup>1,2</sup>, М. Гнатич<sup>2,3,4</sup>, Э. В. Иванова<sup>5</sup>,  
М. В. Компаниец<sup>1,2</sup>, Т. Лучивянский<sup>3</sup>, Л. Мижишин<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Санкт Петербургский государственный университет,  
Санкт Петербург*

<sup>2</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

<sup>3</sup>*P. J. Šafarik University in Košice*

<sup>4</sup>*Institute of Experimental Physics SAS in Košice*

<sup>5</sup>*New Jersey Institute of Technology, New Jersey*

*hnatic@saske.sk*

Исследуется квантово-полевая модель направленной перколяции, которая описывает широкий класс неравновесных стохастических процессов. Проведена ультрафиолетовая ренормировка модели и получено ренормгрупповое уравнение для корреляционных функций. В рамках  $\varepsilon$ -разложения, в котором параметр  $\varepsilon$  характеризует отклонение размерности пространства от его верхнего критического значения равного четырем, впервые в трехпетлевом приближении (с точностью до  $\varepsilon^3$ ) вычислены ренормгрупповые функции —  $\beta$ —функция и аномальные размерности, и найдены координаты инфракрасно-устойчивой фиксированной точки. Вычисление аномальных размерностей позволило найти физически значимые критические индексы, определяющие степенное поведение параметра порядка, среденквадратического радиуса облака активных частиц, корреляционных длин, числа активных узлов и др. при подходе к точке фазового перехода. Пересуммирование полученных по  $\varepsilon$  рядов для  $\varepsilon = 1$  соответствующего физической размерности пространства равной трем, привело к очень хорошему согласию со значениями критических индексов, полученных разными вычислительными методами с использованием Monte Carlo.

## STABLE DROPLETS AND BUBBLES WITHIN THE FUNDAMENTAL MEASURE DFT

**L.A. Gosteva, A.K. Shchekin**

*Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia*

*lagosteva1999@gmail.com*

It was predicted [1] that condensation in the Earth's atmosphere occurs at very low vapor supersaturations due to the presence of submicron hydrophilic aerosols, on which stable and critical droplets can form. Recently, with the use of the squared-gradient density functional theory (DFT), we found [2,3] stable droplets and bubbles around solid lyophilic and, respectively, lyophobic particles. Such droplets and bubbles corresponded to the local minima of the system grand potential. This work aims to validate these results within more rigorous fundamental measure DFT [4].

The density profiles in the fluid around spherical particles with different particle-fluid interaction parameters were computed through numerical minimization of the grand potential using classicalDFT library [5]. Stable droplets as liquid films around lyophilic particle in vapor are observed if the fluid chemical potential is less than certain threshold value. Stable bubbles (vapor shells) form around lyophobic particle in liquid if the fluid chemical potential is larger than another threshold value. If the thresholds are reached, the stable and critical new phase nuclei coincide. New results demonstrate visible structural layering in the density profiles in comparison with the squared-gradient DFT profiles [2,3], but are in fair agreement with them.

This work was supported by the Russian Science Foundation under grant no. 22-13-00151, <https://rscf.ru/en/project/22-13-00151/>.

### **References**

- [1] F.M. Kuni, A.K. Shchekin, A.I. Rusanov and B. Widom *Role of surface forces in heterogeneous nucleation on wettable nuclei*. Adv. Colloid Interface Sci., **65**, 71-124 (1996)
- [2] L.A. Gosteva and A.K. Shchekin *Calculations of Thermodynamic characteristics of vapor interlayers with the use of gradient and integral density functional theories and nudged elastic band method*. Colloid J., **83**, 558-565 (2021)
- [3] A.K. Shchekin, L.A. Gosteva, T.S. Lebedeva and D.V. Tat'yanenko *A unified approach to disjoining pressure in liquid and vapor interlayer within the framework of the density functional theory*. Colloid J., **83**, 263-269 (2021)
- [4] J.F. Lutsko *Explicitly stable fundamental-measure-theory models for classical density functional theory*. Phys. Rev. E, **102**, 062137 (2020)
- [5] J.F. Lutsko *classicalDFT*. GitHub repository, <https://github.com/jimlutsko/classicalDFT>

# ЗЕЕМАНОВСКОЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ЭФФЕКТИВНЫЙ G-ФАКТОР ЭЛЕКТРОНОВ, НАБЛЮДАЕМЫЙ ИЗ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ В АНТИФЕРРОМАГНИТНЫХ МЕТАЛЛАХ И СВЕРХПРОВОДНИКАХ

П.Д. Григорьев<sup>1,2</sup>, Р. Рамазашвили<sup>3</sup>, М.В. Карцовник<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, Черноголовка, Россия

<sup>2</sup> НИТУ «МИСЦ», Москва, Россия

<sup>3</sup> Laboratoire de Physique Theorique, Universite de Toulouse, CNRS, UPS, France

<sup>4</sup> Walther-Meißner-Institut, D-85748 Garching, Germany

E-mail: grigorev@itp.ac.ru

Используя симметричные аргументы теоретически показано [1], что во многих металлах с антиферромагнитным упорядочением эффективный g-фактор носителей заряда, например, измеренный по магнитным квантовым осцилляциям, равен нулю. Этот эффект [1] обнуления эффективного g-фактора электронов происходит из-за его сильной зависимости от импульса и даже смены знака на границе магнитной зоны Брюллюэна, образованной антиферромагнитным упорядочением.

Экспериментальное исследование этого эффекта проводится [1] нами в нескольких соединениях и сравнивается с предложенной теорией. Мы обнаружили, что антиферромагнитное состояние слоистого органического проводника  $\kappa$ -(BETS)<sub>2</sub>FeBr<sub>4</sub> не проявляет спиновой модуляции осцилляций Шубникова-де Гааза, в отличие от парамагнитного состояния того же материала. Это свидетельствует о вырождении уровней Ландау по спину, предсказанное нами для антиферромагнитных проводников. Аналогично, мы не находим спиновой модуляции в угловой зависимости медленных осцилляций Шубникова-де Гааза в оптимально легированном электроном купрате Nd<sub>2-x</sub>Ce<sub>x</sub>CuO<sub>4</sub>. Это указывает на наличие нееевского порядка в этом сверхпроводнике даже при оптимальном легировании.

Наблюдаемый эффект впервые экспериментально демонстрирует еще так называемое зеемановское спин-орбитальное взаимодействие – связь спина электронов с их орбитальным движением из-за зависимости  $g(k)$ . Вблизи границы магнитной зоны Брюллюэна оно оказывается намного сильнее обычного спин-орбитального взаимодействия, что может иметь потенциальные приложения в спинтронике.

## References

- [1] R. Ramazashvili, P.D. Grigoriev, T. Helm, F. Kollmannsberger, M. Kunz, W. Biberacher, E. Kampert, H. Fujiwara, A. Erb, J. Wosnitza, R. Gross, M.V. Kartsovnik, *Experimental evidence for Zeeman spin-orbit coupling in layered antiferromagnetic conductors*, npj Quantum Materials **6**, 11 (2021).



## SIMULATION OF CdSe NANOPATELETS THROUGH THE DFT CLUSTER CALCULATIONS

V.S. Gurin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Research Institute for Physical Chemical Problems, Belarusian State University, Minsk, Belarus*

*E-mail: gurin@bsu.by*

Semiconductor nanoplatelets (NPL) demonstrate increasing interest last years due to successes on the well-controlled synthesis of the few-layer ordered structures of different binary compounds and their challenged features as designed quantum wells [1,2]. In the first approximation, the electronic transitions of NPL may be described by the simple quantum well model in which the well thickness is the main parameter. However, real NPL are protected by surface shells and distorted from the structure of bulk crystals due to the strong surface effects at extreme small sizes. In the present work, structural and optical properties of CdSe NPL with protecting ligands are simulated within the framework of DFT using the cluster approach building the model structures of five atomic layers (Cd-Se-Cd-Se-Cd). The atomic composition of the clusters is  $\text{Cd}_{24}\text{Se}_{16}\text{-R}$ , where  $\text{R}=\text{H}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{SH}$ ,  $\text{OCOH}$ , and  $\text{OPO}(\text{OH})_2$ . The geometry of cluster structures with explicit effects due to the ligand shells were calculated (Fig. 1). The electronic transitions were treated at the TDDFT level for a number of the cluster excited states. The theoretical results are shown to fit general trends of experiment. Principal points of these effects are: (i) the remarkable lattice strain of the initial sphalerite-type CdSe due to the ligands and (ii) decrease of electronic transition energies (red shift of absorption bands) for more polar ligands ( $-\text{SH}$ ,  $-\text{OPO}(\text{OH})_2$ ). The calculations performed can predict new stable low-dimensional structures of binary chalcogenides and allow evaluate their advanced optical applications.

The work was performed under support of the State Program of Scientific Investigations of Belarus “Nanostructure” (2021-2025).

### References

- [1] A. Antanovich, A. Achtstein, A. Matsukovich, A. Prudnikau, P. Bhaskar, V. Gurin, M. Molinary, M. Artemyev. *A strain-induced exciton transition energy shift in CdSe nanoplatelets*. *Nanoscale*, **9**, 18042 (2017).
- [2] M. Nasilowski, B. Mahler, E. Lhuillier, S. Ithurria, B. Dubertret. *Two-dimensional colloidal nanocrystals*. *Chem. Rev.* **116**, 10934 (2016).

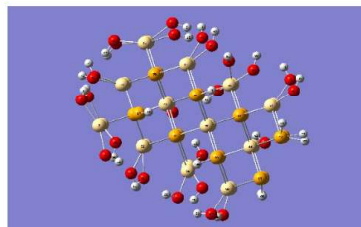


Fig. 1. The calculated cluster structure with  $\text{Cd}_{24}\text{Se}_{16}$  core and OH ligands. Cd – light yellow, Se – orange, O – red, H – white.

## РАДИАЦИОННОЕ ДЕФЕКТОООБРАЗОВАНИЕ В БЕТАПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕ НА КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

А.В. Гурская <sup>1</sup>, М.В. Долгополов <sup>1</sup>, В.И. Чепурнов <sup>2</sup>, Г.В. Пузырная <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

<sup>2</sup> Самарский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия

a-gurska@yandex.ru

Работа посвящена многолетнему исследованию бетапреобразователя, представляющего из себя карбидокремниевую структуру, выращенную на подложке кремния в процессе эндотакции [1]. Радиационные дефекты, происходящие от распада радиоизотопов, которые встроены внутри структуры в процессе легирования приводят к эволюции структуры и изменению её свойств.

В рамках современных подходов к моделированию в материаловедении, таких как, DFT-методы, исследованы электрические свойства структуры в зависимости от концентрации легирующих примесей-продуктов распада углерода-14. Делается попытка применения интеллектуальных подходов к анализу данных о дефектообразовании в структуре. В дополнении к этому рассматривается вопрос положения р-п-перехода в структуре и оптимизация параметров для экспериментальных данных.

Полученные результаты ставятся в сравнение с бетапреобразователями на основе отличных от карбида кремния полупроводников и других радиоизотопов, а также особенностей размещения источников бета-распадов с целью увеличения эффективности бетапреобразования.

### **References**

[1] А.В.Гурская, М.В., Долгополов, В.И. Чепурнов, Н.В. Латухина *Способ получения пористого слоя гетероструктуры карбида кремния на подложке кремния. Патент РФ №2653398 от 8.05.2018.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НОРМАЛЬНЫХ МОД ДИМЕРА НАНОЦИЛИНДРОВ

А.А. Дмитриев<sup>1</sup>, Д.В. Пермяков<sup>1</sup>, М.В. Рыбин<sup>1,2</sup> и  
А.К. Самусев<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> ФТИ и.м. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

[alexei.dmitriev@itmo.ru](mailto:alexei.dmitriev@itmo.ru), <https://physics.itmo.ru>

В последнее время в оптике активно изучаются такие искусственные среды и покрытия как метаматериалы и метаповерхности. Одним из вариантов «кирпичика» для создания таких структур может стать димер из близко расположенных наночастиц. Ожидается, что изменением расстояния между частицами можно управлять набором мод димера — что скажется на макроскопических свойствах метаматериала, — однако на вопрос о закономерностях, по которым это происходит, на данный момент нет чёткого ответа.

Были экспериментально исследованы спектры рассеяния димеров наночилиндров из аморфного кремния диаметром 140 нм и высотой 150 нм, находящихся на подложке из кварца [1]. Изучались димеры с расстоянием между цилиндрами от 10 до 110 нм. На спектрах имеется резонансный пик в области длин волн 550–600 нм, что соответствует магнитно-дипольному резонансу. Наблюдается расщепление данного пика на два, причём расстояние между ними немонотонно зависит от расстояния между цилиндрами в димере.

Для объяснения полученных экспериментальных данных была построена теория, основанная на методе связанных диполей. При помощи неё была обнаружена спиралевидная зависимость комплексных собственных частот мод димера от расстояния между частицами, что соответствует режиму слабой оптической связи [2] и объясняет немонотонность расщепления, наблюдаемую в экспериментальных данных.

## Список литературы

- [1] R.M. Bakker, D. Permyakov, Y.F. Yu, D. Markovich, R. Paniagua-Domínguez, L. Gonzaga, A. Samusev, Y. Kivshar, B. Luk'yanchuk, A. I. Kuznetsov *Magnetic and Electric Hotspots with Silicon Nanodimers*. Nano Lett., **15**, 2137–2142 (2015)

- [2] A.A. Dmitriev, M.V. Rybin, *Combining isolated scatterers into a dimer by strong optical coupling* Phys. Rev. A, **99**, 063837 (2019)

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СКОПЛЕНИЯХ ДВИЖУЩИХСЯ РОБОТОВ

А.А. Молодцова<sup>1</sup>, А.Д. Розенблит<sup>1</sup>, А.А. Дмитриев<sup>1</sup>,  
В.А. Порватов<sup>2</sup>, М.К. Бузаков<sup>1</sup>, В.А. Смирнов<sup>1</sup>,  
Д.В. Сенникова<sup>1</sup>, О.И. Бурмистров<sup>1</sup>, Е.М. Пухтина<sup>1</sup>,  
А. Суслов<sup>3</sup>, и Н.А. Олехно<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>2</sup> *University of Amsterdam, Amsterdam, The Netherlands*

<sup>3</sup> *University of Bath, Bath, UK*

*alexeu.dmitriev@metalab.ifmo.ru, <https://physics.itmo.ru>*

Ряд биологических систем, например, колонии бактерий, косяки рыб или стаи птиц, могут рассматриваться как скопления частиц, способных преобразовывать внутренние или внешние запасы энергии в направленное движение [1]. Широкий интерес привлекают и схожие искусственные среды, например, из движущихся микрочастиц [2]. Их изучению посвящён молодой, но бурно развивающийся раздел физики конденсированного состояния — физика активной материи (active matter). Отличительной особенностью таких систем является их неравновесность, приводящая к проявлению ряда интересных эффектов, в том числе различных процессов самоорганизации.

В данной работе экспериментально исследуются скопления из большого числа движущихся роботов. В частности, рассматривается фазовый переход между подвижной “жидкостью” и неподвижным “твёрдым телом” из роботов, помещённых в ограничительный барьер — jamming transition. Впервые экспериментально определено критическое значение плотности для наступления jamming transition в системе из круглых роботов, вращающихся вокруг своей оси, а также извлечены критические индексы, описывающие степенные законы изменения среднего размера кластеров и подвижности роботов вблизи точки фазового перехода. Также, рассмотрена система из поступательно движущихся роботов вытянутой формы и исследована зависимость образования твёрдой фазы в такой системе от активности движения роботов.

## Список литературы

- [1] T. Vicsek, A. Zafeiris, *Collective motion*. Physics Reports **517**, 71-140 (2012)
- [2] S. Ramaswamy, *Active Matter*. J. Stat. Mech. **2017**, 054002 (2017)

## МАСШТАБИРОВАНИЕ НАНОЧИПОВ-ГЕНЕРАТОРОВ ДЛЯ БЕТАВОЛЬТАИКИ

А.В. Гурская <sup>1</sup>, М.В. Долгополов <sup>1</sup>, С.А. Раджапов <sup>2</sup>

<sup>1</sup>Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

<sup>2</sup> Физико-технический институт Научно-производственного объединения  
«Физика-Солнце» Академии наук Республики Узбекистан. Ташкент

*mikhaildolgoplov68@gmail.com*

В работе обсуждается увеличение эффективности преобразования энергии радионуклидов в электрическую путем металлизации бетавольтаических наночипов-генераторов на карбиде кремния. В молекулярном составе полупроводниковых структур карбида кремния атомы углерода-14 функционально выполняют роль источника энергии, а компонент разделения неравновесных носителей полупроводниковой гетероструктурой способен напрямую преобразовывать эту энергию в электрическую форму. Предлагаемый вариант исполнения масштабирования металлизацией выращенной структуры бета-преобразователя на радионуклиде С-14 обладает новизной благодаря тому, что данный радионуклид используется в концентрации на уровне легирующей примеси, замещающей атомы стабильного углерода-12 в молекуле карбида кремния, в наночипах-генераторах размером менее 1 мм<sup>2</sup> на поверхности гетероструктур с плотностью размещения от ста на см<sup>2</sup>. В результате, присутствие в небольших количествах, один атом радиоизотопа С-14 и более на миллион атомов устойчивого радиоизотопа С-12, придает полупроводниковому материалу новые полезные в энергетическом отношении свойства. Проблема сбора носителей заряда решается металлизацией контактных площадок чипов. Особенностью является уменьшение электронного сродства преобразованного радионуклидом карбида кремния. Данный фактор определяет в основном эффективность сбора носителей заряда.

### **References**

- [1] В.И. Чепурнов, С.А. Раджапов, М.В. Долгополов, Г.В. Пузырная, А.В. Гурская, Задачи определения эффективности для микроструктур SiC\*/Si и контактообразования, *Comp. nanotechnol.*, 2021, № 3, 59–68.

## РАЗВИТИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ МИЦЕЛЛЯРНЫХ СИСТЕМ

Ю.А. Ерошкин<sup>1</sup>, Л.Ц. Аджемян<sup>1</sup>, А.К. Щёкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Санкт-Петербургский Государственный университет, Санкт-Петербург,  
Россия*

*eroshkin-spb@yandex.ru*

Явление образования устойчивых агрегатов в растворах поверхностно-активных веществ (ПАВ), называемых мицеллами, известно уже более ста лет и нашло широкое применение в современных технологиях очистки, разделения веществ и синтеза наночастиц. Основы теоретического описания кинетики мицеллообразования были заложены в работах Анианссона, в которых использовалась непрерывная аппроксимация Фоккера-Планка для конечно-разностных уравнений Беккера-Дёринга, описывающих молекулярный механизм агрегации.

Однако произведённые ранее численные расчёты показывают что, несмотря на то что аналитическая теория молекулярного механизма мицеллярной релаксации в растворах как со сферическими, так и с цилиндрическими мицеллами приводит к хорошему согласию для времени медленной релаксации, качество предсказаний спектра быстрой релаксации остаётся неудовлетворительным.

Нами была разработана общая аналитическая схема перехода к непрерывному описанию мицеллярной релаксации, не использующая аппроксимации для работы агрегации и коэффициентов присоединения, в рамках которой получено уравнение, определяющее спектр быстрой релаксации мицеллярных систем. Это уравнение было успешно применено в аналитических и полуаналитических расчётах спектра быстрой релаксации для различных мицеллярных систем. С его помощью получены результаты, хорошо согласующиеся с предсказаниями, полученными при численном решении уравнений Беккера-Дёринга.

### **Финансирование работы**

Работа была выполнена при финансовой поддержке ММИ имени Эйлера (Соглашение 075-15-2022- 287) и РФФИ (грант № 20-03-00641\_a)



## THERMALIZATION WITH NON-ZERO INITIAL ANOMALOUS QUANTUM AVERAGES

K.A. Kazarnovskii<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *MIPT, Moscow, Russia*

*kazarnovsky@list.ru*

We discuss thermalization process in the kinetic approximation in the presence of non-zero initial anomalous quantum expectation values on top of an initial non-plankian (non-thermal) level population. Namely we derive a system of “kinetic” equations for the level population and anomalous expectation values in four-dimensional massive scalar field theory with  $\phi^4$  self-interaction. We show analytically in the linear approximation that for small initial anomalous quantum average it relaxes down to zero. We show analytically that this system does not have an equilibrium solution with non-zero time independent anomalous expectation value.

In this paper we consider an initial state, containing non-plankian (non-thermal) level population, which is expressed via  $Tr[\hat{\rho} a_q^+ a_{\vec{q}'}] \equiv \langle a_q^+ a_{\vec{q}'} \rangle$ , and anomalous averages,  $Tr[\hat{\rho} a_{\vec{q}} a_{\vec{q}'}] \equiv \langle a_{\vec{q}} a_{\vec{q}'} \rangle$ . Our goal is to show that such a state will evolve in time towards the plankian level population,  $n_p = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_p} - 1}$ , and zero anomalous average. The plankian distribution of modes,  $n_p$ , is over the Poincare invariant ground state. Namely we would like to see thermalization process even for such an unusual initial state, which contains anomalous averages.

To show this phenomenon we derive a system of kinetic equations for the level-population and anomalous average. Then we show that this system has a solution with zero anomalous average and plankian level-population only for such modes, which diagonalize the free Hamiltonian. To derive the system of the generalized kinetic equations we use the standard text book methods. To have an analytic headway we consider spatially homogeneous states and small initial anomalous averages. But we also derive the system of kinetic equations for  $n_p$  and  $\chi_p$  without the latter assumptions.

### Список литературы

- [1] Universe **8**(3), 162, (2022)

**RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS OF A  
SELF-ORGANIZED CRITICAL SYSTEM: INTRINSIC  
ANISOTROPY VS RANDOM ENVIRONMENT**

**N.V. Antonov<sup>1,2</sup>, P.I. Kakin<sup>1</sup>, N.M. Lebedev<sup>2</sup> and A.Yu. Luchin<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

<sup>2</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

*p.kakin@spbu.ru*

A system with self-organized criticality in a randomly moving environment is studied within the field theoretic renormalization group. The system is described by the anisotropic model of a “running sandpile” (continuous stochastic equation) introduced by Hwa and Kardar in [1]. Moving environment is modelled by the Navier-Stokes equation for a randomly stirred incompressible fluid. Possible types of critical behaviour, associated with attractors of the renormalization group equations, and their stability regions are identified in the leading one-loop approximation. The model provides an example of competition between strongly anisotropic intrinsic dynamics and external isotropic disturbance by the random environment: depending on the relation between the model parameters, the anisotropic Hwa-Kardar interaction is either “washed away” by the moving environment or the competition between the interactions results in a new “softly anisotropic” universality class. The latter case is related to a line of fixed points that become infrared attractive simultaneously. As the calculations are performed in one-loop approximation, it is unclear whether the line of fixed points is indicative of non-universality or if it is an artefact of approximation.

## **Список литературы**

- [1] T. Hwa, M. Kardar, *Avalanches, hydrodynamics, and discharge events in models of sandpiles*. Phys. Rev. A **45**, 7002 (1992)

## ON THE HYDRODYNAMIC STIRRING OF A SCALAR FIELD

G. Kalagov

*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

*kalagov.g@gmail.com*

Divers complex fluids—binary mixtures—are described by continuum field equations, to which a stochastic noise is added to capture thermal and hydrodynamic fluctuations. This study reveals the interplay between critical ordering and chaotic eddy flows. The Cahn–Hilliard equation coupled to the random Gaussian velocity field, which mimics Kolmogorov turbulence, is investigated on large scales via the functional renormalization group (FRG) approach [1]. Numerical analysis was performed in the leading order of the nonperturbative expansion for the FRG equation, possible scaling regimes were obtained, and the respective universal exponents were estimated.

## References

- [1] N. Dupuis et al., *The nonperturbative functional renormalization group and its applications*. Physics Reports, **910**, 1 (2021)

## HYBRID ORGANIC/INORGANIC NANOSTRUCTURES FOR SPINTRONICS AND PHOTONICS

D.G. Kvashnin<sup>1</sup>, E.V. Sukhanova<sup>1</sup>, Z.I. Popov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Emanuel Institute of Biochemical Physics RAS, Moscow, Russian Federation*

*dgkvashnin@phystech.edu, biomiteorlab.com*

Recent development of 2D materials opens a new way for the fabrication of low-dimensional structures with desired properties via controllable way. The most promising materials for nanoelectronics devices in the near future are graphene and different heterostructures based on them. Thus, it is necessary to create mechanisms of controlled modification of graphene electronic and magnetic properties to expand the application of graphene. Previous studies showed that this can be done by various techniques, for example, by using different substrates, mechanical deformations, chemical functionalization, introducing of various defects in graphene structure, and formation of heterostructures based on graphene. By combining different two-dimensional (like graphene, BN) and quasi-two-dimensional materials (for example, TMD) layered structures with van der Waals interlayer interaction can be obtained. In such materials the properties of individual components can be not only preserved but also new unique features can appear. Here the theoretical studies of effective way of modifying of physical and chemical properties of 2D structures via organic compounds and inorganic 2D materials functionalization were presented [1,2]. Features of the atomic structure and physical and chemical properties in a pair with possible ways for tuning of magnetic properties and shift the absorption spectra toward the visible range of the wavelength was performed.

The work was supported by the Russian Science Foundation (No. 21-73-10238).

### **References**

- [1] E.V.Sukhanova, D. G. Kvashnin, Z. I. Popov *Induced Spin Polarization in Graphene via Interaction with Halogen Doped MoS<sub>2</sub> and MoSe<sub>2</sub> Monolayers by DFT Calculations*. *Nanoscale* **12**, 23248–23258 (2020).
- [2] E. V. Sukhanova, Z. I. Popov, D. G. Kvashnin *Theoretical Study of the Electronic and Optical Properties of a Heterostructure Based on PTCDA Organic Semiconductor and MoSe<sub>2</sub>*. *Jetp Lett.* **111**, 627–632 (2020).

**INFLUENCE OF RANDOM VELOCITY FIELD ON THE  
ANOMALOUS KINETICS OF A MULTI-SPECIES  
REACTION-DIFFUSION SYSTEM**

**M. Hnatič<sup>1,2,3</sup>, M. Kecer<sup>1</sup> and T. Lučivjanský<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Faculty of Sciences, P.J. Šafárik University, 04154 Košice, Slovakia,*

<sup>2</sup>*Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Watsonova  
47, 040 01 Košice, Slovakia,*

<sup>3</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR, 141980 Dubna,  
Moscow Region, Russia.*

*hnatic@saske.sk, matej.kecer@student.upjs.sk, tomas.lucivjansky@upjs.sk*

Reaction-diffusion systems, where the reacting particles are subject to diffusion processes, are one of the common examples of nonlinear statistical systems. In low space dimensions  $d \leq 2$  the usual description by means of kinetic rate equations is not sufficient and the effect of density fluctuations has to be taken into an account. Our aim here is to analyze specific multi-species reaction-diffusion system with reactions  $A + A \rightarrow (\emptyset, A)$ ,  $A + B \rightarrow A$  at and below its critical dimension  $d_c = 2$ . In particular, we investigate effect of thermal fluctuations on the reaction kinetics, which are generated by means of random velocity field modelled by a stochastic Navier-Stokes equations. Our main theoretical tool is perturbative field-theoretic renormalization group. The analysis is performed to the first order of the perturbation scheme (one-loop approximation).

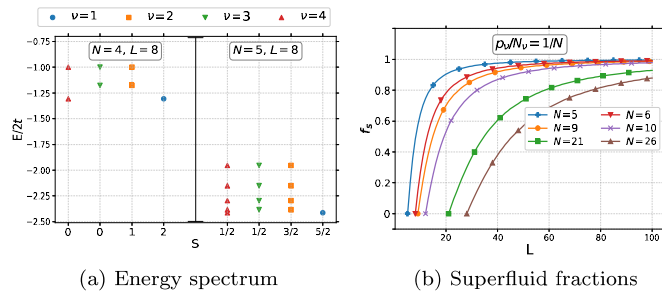
# SPIN-FLIP INDUCED SUPERFLUIDITY IN A RING OF HARD-CORE BOSONS

K.K. Kesharpu<sup>1,\*</sup>, E.A. Kochetov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 141980, Russia*

\*kesharpu@theor.jinr.ru

In this work we theoretically investigate the physics of one of the simplest system, yet rich in physics, that can be constructed using spinor bosons: the  $1D$  ring lattice loaded with spinful hard-core bosons (HCB) [1]. Our main focus is the investigation of the ground state properties and the necessary condition for occurrence of superfluidity in these systems. We solve the  $t - J$  Hamiltonian of the spinful hard-core bosonic ring in the *Nagaoka limit*. The energy spectrum becomes quantized due to presence of spin, where each energy level corresponds to a cyclic permutation state of the spin chains. The ground state is true ferromagnetic when the ring contains  $N = 2, 3$  spinful hard-core bosons; for all other  $N$  it is a mixture of the ferromagnetic and non-ferromagnetic states. This behaviour is different from the fermionic ring, where ground state is true ferromagnetic only for  $N = 3$ . It is shown that the intrinsic spin generated gauge fields are analogous to the synthetic gauge fields generated by rotation of either the condensate or the confining potential. It is argued that the low lying excited levels of the spin flipped states intrinsically support the superfluidity. Possible ways to experimentally verify these results are also discussed. We also discuss the application of this system. In Fig. 1a and 1b we calculate the energy spectrum and the superfluid fraction in for  $N$  no. of particles in  $L$  sites;  $\nu$ ,  $p_\nu$  and  $N_\nu$  represent the spin block, permutation states, and the size of the spinblock respectively.



## References

- [1] M. A. Cazalilla, R. Citro, T. Giamarchi, E. Orignac, and M. Rigol, Reviews of Modern Physics, **83**, 1405 (2011)

The manuscript has been accepted in *APS Physical Rev. A*.

## CONVERGENT PERTURBATION THEORY FOR $\phi^4$ AND QED IN STRONG COUPLING LIMIT

M.V. Komarova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia  
frommarina@mail.ru*

Quantum field methods usually generate asymptotic perturbation series. In this situation, strong coupling limit is an important tool for obtaining numerical values such as resummation parameters, etc.

We present a method for studying the strong coupling asymptotics in quantum field models. The widely known  $\phi^4$  theory and QED are used as a testing ground.

We applied the so-called formalism of convergent quantum field perturbation series with an additional parameter. Here, the expansion is calculated in terms of an auxiliary coupling constant, and the additional parameter can be chosen arbitrarily. Such series turn out to be convergent in some known circle of convergence with respect to the standard coupling constant. The size of the circle of convergence is controlled by the value of the additional parameter. By choosing this parameter in appropriate manner, one can determine numerical values for arbitrarily large values of the standard coupling constant.

In the  $\phi^4$  model, we calculated the strong coupling asymptotics for the RG functions, refining the characteristics that caused discrepancies among different authors. In QED, we applied a similar approach, which allowed us to draw conclusions about the physical nature of the specific properties of the beta function – the so-called "Landau pole" or the "Moscow zero".

## КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ КАПЕЛЬ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСА

**В.Н. Кондратьев<sup>1,2</sup>,**

<sup>1</sup> *Лаборатория Теоретической Физики имени Н.Н.Боголюбова, ОИЯИ, 141980,  
Дубна, Россия*

<sup>2</sup> *Государственный университет «Дубна», ул. Университетская, 19, 141982  
Дубна, Российская Федерация*

[vkondrat@theor.jinr.ru](mailto:vkondrat@theor.jinr.ru)

Динамика и фрагментация горячей системы ван-дер-Ваальса конечных размеров (капли) исследуются в рамках подхода классической молекулярной динамики. Показано, что при некоторых условиях, определяемых, главным образом, начальной энергией возбуждения, фрагментация атомных ядер и кластеров проявляет критическое поведение. Это поведение оставляет свои сигналы в инклюзивных распределениях по массам и условных моментах образованных фрагментов. Связь между наблюдаемым критическим поведением и фазовым переходом жидкость-газ второго рода исследуется с использованием капельной модели Фишера для средних распределений фрагментов по массе и выполнения анализа Кампи для корреляционных и флуктуационных свойств распределений фрагментов. Обсуждается зависимость сигналов критического поведения от размера капли. Резкое изменение стабильности капель при температурах, соответствующих критической изэнтропе, показано на основе анализа размеров наибольшего осколка.



## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ТОК МЕЖДУ СУПЕРПАРАМАГНИТАМИ

**В.Н. Кондратьев<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> *Лаборатория Теоретической Физики имени Н.Н.Боголюбова, ОИЯИ, 141980, Дубна, Россия*

<sup>2</sup> *Государственный университет «Дубна», ул. Университетская, 19, 141982 Дубна, Российская Федерация*

[vkondrat@theor.jinr.ru](mailto:vkondrat@theor.jinr.ru)

Рассмотрена динамика бесспиновых заряженных квазичастиц между двумя суперпарамагнитными наночастицами (СПМ), расположенными на расстоянии  $l$ . В непосредственной близости от СПМ с локальной намагниченностью при напряженности поля  $H$  состояние квазичастиц соответствует уровням Ландау с энергией  $\omega_L = \mu_B B/m$ , где  $\mu_B$  магнетон Бора и эффективная масса  $m$  в единицах массы электрона. При параллельном направлении СПМ полей энергия уровней Ландау показывает плавное пространственное поведение, когда электрическое сопротивление определяется временем релаксации  $\tau_{rel}$ .

Для анти параллельной ориентации СПМ уровни Ландау, закрученные вверх и вниз, пересекаются. Такая геометрия подразумевает блокирование тока. Однако, в точке квазипересечения уровней переход Ландау-Зенера, частично, восстанавливает электрическую проводимость. При этом, эффект гигантского магнитосопротивления (ГМС) определяется отношением времен пролета между СПМ  $\tau_p$  и релаксации  $\tau_{rel}$ ,  $(\tau_p / \tau_{rel})$ . Когда эта величина мала ГМС может быть большим. Например, в случае соотношения  $(\tau_p / \tau_{rel}) \sim 0,1$  и  $H \sim 1$  кГс сигнал ГМС может достигать 100% даже при комнатной температуре. Такие свойства вместе с возможностью гибкого механизма расположения СПМ позволяют реализовать системы гранулированных датчиков ГМС особенно высокой чувствительности.

## FIELD THEORETIC RENORMALIZATION STUDY OF INTERACTION CORRECTIONS TO THE UNIVERSAL CONDUCTIVITY OF GRAPHENE

S. Teber, A.V. Kotikov

*E-mail: kotikov@theor.jinr.ru*

The two-loop interaction correction coefficient to the universal conductivity of disorder-free intrinsic graphene is computed with the help of a field theoretic renormalization study using the Bogolubov-Parasuk-Hepp-Zimmermann prescription. Non-standard Ward identities imply that divergent subgraphs (related to Fermi velocity renormalization) contribute to the renormalized optical conductivity. A well-defined value is obtained:  $C = (19 - 6\pi)/12 = 0.01$  in agreement with the result first obtained by Mishchenko and which is compatible with experimental uncertainties.

## **ELECTRICAL RESISTIVITY OF POLYCRYSTALLINE GRAPHENE: EFFECT OF GRAIN-BOUNDARY-INDUCED STRAIN FIELDS**

**S.E. Krasavin<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear  
Research, Dubna, Moscow Region, Russian Federation*

*sergey.e.krasavin@gmail.com*

We have revealed the decisive role of grain-boundary-induced strain fields in electron scattering in polycrystalline graphene. To this end, we have formulated the model based on Boltzmann transport theory which properly takes into account the microscopic structure of grain boundaries (GB) as a repeated sequence of heptagon–pentagon pairs. We show that at naturally low GB charges the strain field scattering dominates and leads to physically reasonable and, what is important, experimentally observable values of the electrical resistivity. It ranges from 0.1 to 10 k $\mu$ m for different types of symmetric GBs with a size of 1  $\mu$ m and has a strong dependence on misorientation angle. For low-angle highly charged GBs, two scattering mechanisms may compete. The resistivity increases markedly with decreasing GB size and reaches values of 60 k $\mu$ m and more. It is also very sensitive to the presence of irregularities modeled by embedding of partial disclination dipoles. With significant distortion, we found an increase in resistance by more than an order of magnitude, which is directly related to the destruction of diffraction on the GB. Our findings may be of interest both in the interpretation of experimental data and in the design of electronic devices based on poly- and nanocrystalline graphene.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ СПОНТАННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В РАМКАХ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ПРИ ПОМОЩИ ТЕОРИИ ОПТИМИЗИРОВАННОГО ЭФФЕКТИВНОГО ПОТЕНЦИАЛА

А. Кудлис<sup>1</sup>, И. Иорш<sup>2</sup>, И. Токатлы<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Физический факультет, Университет ИТМО, Санкт-Петербург,  
197101, Россия*

<sup>2</sup> *KERBASQUE, Basque Foundation for Science, 48009 Bilbao, Spain  
E-mail, andrewkudlis@gmail.com*

Последние успехи в области поляритонной химии, часто называемой КЭД-химией [1, 2], требуют от исследователей развития теоретических методов описания реалистичных многоэлектронных систем, которые сильно взаимодействуют со светом. В данном докладе мы хотели бы показать, каким образом нам удалось обобщить формализм метода оптимизированного эффективного потенциала на случай непрерывного распределения фотонных мод. Это позволило нам смоделировать диссипативную динамику электронной подсистемы, взаимодействующей с модами резонатора, в котором присутствуют потери [3]. В частности, мы проверили способность данной техники уловить чисто квантовомеханические особенности электрон-фотонного взаимодействия, связанного с спонтанным излучением и передачей энергии от электронов к модам резонатора. Была проанализирована некая модельная трехуровневая система с одним электроном, связанным с фотонами. Такая модель является в некоем смысле минимальной, т.к. позволяет исключить классическое излучение из рассмотрения. Изучив два типичных спектральных распределения фотонных мод, мы обнаружили, что теория оптимизированного эффективного потенциала демонстрирует как качественное, так и количественное согласие с результатами, полученными при помощи точного решения уравнения Шредингера в том случае, когда в системе доминируют однофотонные процессы.

## Список литературы

- [1] James A. Hutchison, Tal Schwartz, Cyriaque Genet, Eloise Devaux, and Thomas W. Ebbesen, *Modifying chemical landscapes by coupling to vacuum fields*. Angew. Chem. Int. Ed., **51**, 1592–1596 (2012).

- [2] Thomas W. Ebbesen, *Hybrid light-matter states in a molecular and material science perspective*. Accounts of Chemical Research, **49**, 2403–2412 (2016).
- [3] A. Kudlis, I. Iorsh, and I. V. Tokatly, *Dissipation and spontaneous emission in quantum electrodynamical density functional theory based on optimized effective potential: A proof of concept study*. Phys. Rev. B, **105**, 054317 (2022).

**RESONANCE PHENOMENA IN NANOMAGNET +  
JOSEPHSON JUNCTION SYSTEM UNDER EXTERNAL  
PERIODIC DRIVE**

**Kulikov K.V.<sup>1,2</sup>, M. Nashaat<sup>1,3</sup>, M. Sameh<sup>3</sup>, D. V. Anghel<sup>1,4</sup> and  
Yu. M. Shukrinov<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>*BLTP, JINR, Dubna, Moscow region, 141980, Russia,*

<sup>2</sup>*Dubna State University, Dubna, Russia,*

<sup>3</sup>*Department of Physics, Faculty of Science, Cairo University, 12613, Giza,  
Egypt,* <sup>4</sup>*Horia Hulubei National Institute for R&D in Physics and Nuclear  
Engineering, Măgurele, Romania.*

*kulikov@theor.jinr.ru*

We demonstrated resonance effects in a system of nanomagnet coupled to the Josephson junction under the influence of external periodic drive. We show that the applied periodic drive brings to the appearance of additional resonance peaks, which positions determine by the driving frequency. The heights of the resonance peaks depend on the driving amplitude as a Bessel function. We develop a thorough analytical description that allows to classify all possible resonances arising in the system. The obtained result provide a method for controlling the resonance properties of the system. It has been demonstrated that by changing the amplitude of periodic drive it is possible to suppress the main ferromagnetic resonance and at the same time excite a new one with required amplitude and frequency. We consider that the obtained results open a wide field of research and applications related to the resonance properties of hybrid structures. Such a realization might play a crucial role in quantum information processing and spintronics.

# FUNCTIONAL RENORMALIZATION GROUP IN THE HIGHLY NONLINEAR MODEL OF A GROWING PHASE BOUNDARY

N.M. Lebedev<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*  
*lebedev@theor.jinr.ru*

In this contribution the application of the means of functional renormalization group to the model describing a randomly growing phase boundary will be discussed. The stochastic equation to be considered was introduced in [1] as a modification of Kardar–Parisi–Zhang equation, while in [2] it was shown that corresponding renormalizable field theory should include infinitely many interaction terms. We will discuss how the critical properties of a model with infinite number of interactions can be studied within the FRG framework and present our first results on possible critical regimes.

## Список литературы

- [1] S.I. Pavlik, JETP **79**, 303 (1994)
- [2] N.V. Antonov, A.N. Vasil'ev Zh. Eksp. Teor. Fiz. **108**, 885-893 (1995)

## ОБУЧЕНИЕ МАГНИТНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ В ПРИСУТСТВИИ СЛУЧАЙНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ

И. С. Лобанов, В. М. Уздин

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: igor.lobanov@metalab.ifmo.ru

В настоящее время активно разрабатываются реализации искусственных нейронных сетей на основе новых физических принципов с целью повышения энергоэффективности и вычислительной мощности устройств, решающих задачи искусственного интеллекта [1]. Мы предлагаем дизайн магнитной наносистемы, способной реализовать не только вычисление нейронной сети, но и её обучение без использования классических компьютеров, что невозможно в большинстве альтернативных реализаций. Для хранения весов нейронов мы используем эффекты гистерезиса в магнитных системах, а обучение сети опирается на диссипацию, что позволяет использовать электрические схемы только для ввода-вывода данных. Работоспособность данного подхода иллюстрируется с помощью численного моделирования магнитной нейронной сети, способной решать задачи классификации.

Обучение магнитной нейронной сети происходит за счет переключения между метастабильными состояниями, которые также могут происходить случайным образом за счет температурных флуктуаций. Параметры системы подбираются таким образом, чтобы активационные барьеры были достаточно высокими, чтобы сеть помнила свои веса, однако достаточно низкими, чтобы обеспечить энергоэффективность устройства. Так как частота осцилляций отдельных спинов на порядки меньше частоты температурных переходов, мы используем ранее развитые нами численные методы для вычисления частот переходов в рамках теории переходного состояния [2]. Нами получены пути с наименьшим перепадом энергии, соответствующие наиболее вероятному механизму перехода между метастабильными состояниями, найдены активационные барьеры для системы с разными состояниями входов и выходов, что позволило оценить диапазон температур, в котором магнитная нейронная сеть может функционировать, и изучить зависимость устойчивости схемы от ее физического размера.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00565, <https://rscf.ru/project/22-22-00565/>.

### **References**

- [1] Marković, D., Mizrahi, A., Querlioz, D. et al. Physics for neuromorphic computing. Nat Rev Phys 2, 499–510 (2020).
- [2] И.С. Лобанов, М.Н. Поткина, В.М. Уздин, *Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (Миниобзор)*. Письма в ЖЭТФ, **113** (12), 833 (2021)



## MAGNETIZATION DYNAMICS SIGNATURE ON IV CURVES OF OVERDAMPED S/F/S JOSEPHSON JUNCTION

**A.A. Mazanik<sup>1,2</sup>, I.R. Rahmonov<sup>1,2,3,4</sup>, A.E. Botha<sup>5</sup>, and Yu.M. Shukrinov<sup>1,2,3</sup>**

<sup>1</sup>*MIPT, Dolgoprudny, Moscow Region 141700, Russia*

<sup>2</sup>*BLTP, JINR, Dubna, Moscow Region 141980, Russia*

<sup>3</sup>*Dubna State University, Dubna, Moscow Region 141980, Russia*

<sup>4</sup>*Umarov Physical Technical Institute, TAS, Dushanbe 734063, Tajikistan*

<sup>5</sup>*Department of Physics, University of South Africa, Private Bag X6,*

*Florida 1710, South Africa*

*mazanandrey@gmail.com*

It is well-known that there are no chaos and hysteresis in current-voltage characteristics (CVC) of overdamped (i.e. without electrical capacitance) Josephson junctions under external radiation [1]. In this work, we consider overdamped superconductor-ferromagnet-superconductor Josephson junctions, where the spin-orbit coupling is presented in the interlayer, thus, the junctions exhibit anomalous Josephson effect with the current-phase relation  $I_s = I_c \sin(\varphi - \varphi_0)$ , where  $\varphi_0$  is the anomalous phase shift, [2, 3, 4, 5]. We demonstrate that in such systems under external radiation chaotic regions and hysteric behavior are presented in the CVC of junctions without capacity. We show how those features are connected to the magnetization dynamics of the interlayer. The connection between the magnetization dynamics and the CVC is controlled by the particular form of the current phase relation of the junction  $I_s(\varphi, \mathbf{m}) = I_c(\mathbf{m}) \sin(\varphi - \varphi_0)$  with  $\mathbf{m}$  being the magnetization of the interlayer.

## Список литературы

- [1] Kautz, Richard L., and R. Monaco., Journal of applied physics 57.3 (1985): 875-889.
- [2] Buzdin, A., Physical review letters 101.10 (2008): 107005.
- [3] Nashaat, M., et al., Physical Review B 100.5 (2019): 054506.
- [4] Bobkova, I. V., et al., Physical Review B 102.13 (2020): 134505.
- [5] Shukrinov, Yu. M., Physics-Uspekhi 65.4 (2022): 317.

**AB INITIO GUIDED MINIMAL MODEL FOR THE “KITAEV”  
MATERIAL  $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ : IMPORTANCE OF DIRECT  
HOPPING, THIRD-NEIGHBOR EXCHANGE AND  
QUANTUM FLUCTUATIONS**

**Pavel A. Maksimov<sup>1,2</sup>, Alexey V. Ushakov<sup>2</sup>, Zlata V. Pchelkina<sup>2,3</sup>,**

**Ying Li<sup>4</sup>, Stephen M. Winter<sup>5</sup> and Sergey V. Streltsov<sup>2,3</sup>**

<sup>1</sup>*Bogolyubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear  
Research, Dubna, Moscow region 141980, Russia*

<sup>2</sup>*M.N. Miheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian  
Academy of Sciences, S. Kovalevskaya St. 18, 620990 Ekaterinburg, Russia*

<sup>3</sup>*Department of theoretical physics and applied mathematics, Ural Federal  
University, Mira St. 19, 620002 Ekaterinburg, Russia*

<sup>4</sup>*Department of Applied Physics and MOE Key Laboratory for  
Nonequilibrium Synthesis and Modulation of Condensed Matter, School of  
Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*

<sup>5</sup>*Department of Physics and Center for Functional Materials, Wake Forest  
University, NC 27109, USA  
maksimov@theor.jinr.ru*

By considering two *ab initio*-based complementary approaches, we analyze the electronic structure and extract effective spin models of  $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ , a material which has been proposed as a possible candidate for Kitaev physics [1, 2]. Both methods show that the dominant direct hopping makes the bond-dependent Kitaev term negligible moving the material away from the sought-after spin-liquid regime. As a result, we present a simple three-parameter exchange model to describe the interactions of the lowest doublet of the honeycomb cobaltate  $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ . Remarkably, it is the third-neighbor interactions, both isotropic and anisotropic, that are responsible for the standout double-zigzag ground state of  $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ , stabilized by quantum fluctuations. A significantly large third-nearest neighbor hopping, observed in *ab initio*, supports the importance of the third-neighbor interactions in the stabilization of the unique ground state of  $\text{BaCo}_2(\text{AsO}_4)_2$ .

## Список литературы

- [1] A. Kitaev, *Anyons in an exactly solved model and beyond*. Annals of Physics, **321**, 2 (2006)
- [2] H. Liu, J. c. v. Chaloupka, and G. Khaliullin, *Kitaev spin liquid in 3d transition metal compounds*. Phys. Rev. Lett., **125**, 047201 (2020)

## ЭФФЕКТ КАЗИМИРА ДЛЯ ДИФРАКЦИОННЫХ РЕШЕТОК И ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ

В.Н. Марачевский<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Российская  
Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9  
*v.marachevsky@spbu.ru, maraval@mail.ru*

В работах [1, 2] разработан теоретический формализм для вычисления энергии Казимира двух бесконечных дифракционных решеток, периодических в заданном пространственном направлении и разделенных вакуумной щелью.

В работе [3] впервые исследован новый класс физических явлений: геометрические переходы. Энергия Казимира на единицу площади двух идеально выровненных бесконечных дифракционных решеток отличается от аналогичной величины для двух бесконечных решеток в пределе бесконечно малого угла поворота одной решетки относительно другой. Возникает геометрический переход: разрыв энергии Казимира при угле поворота, равном нулю.

Следствием геометрического перехода является возможность создания сколь угодно больших значений крутящего момента на единицу площади для конечных дифракционных решеток при увеличении их размеров. Данное свойство взаимодействующих дифракционных решеток может быть использовано для эффективной бесконтактной передачи крутящего момента в науке и технологиях.

Участие автора в работе международной конференции "Современные проблемы теории конденсированных сред (ТКС 2022)" поддержано проектом РНФ № 22 – 13 – 00151.

## Список литературы

- [1] A. Lambrecht and V.N. Marachevsky, *Casimir interaction of dielectric gratings*. Phys.Rev.Lett., **101**, 160403 (2008)
- [2] A. Lambrecht and V.N. Marachevsky, *Theory of the Casimir effect in one-dimensional periodic dielectric systems*. Int. J. Mod. Phys. A, **24**, 17891795 (2009)

- [3] M. Antezza, H.B. Chan, B. Guizal, V.N. Marachevsky, R. Messina and M. Wang, *Giant Casimir torque between rotated gratings and the  $\theta = 0$  anomaly*. Phys.Rev.Lett., **124**, 013903 (2020)

## ON THE EFFICIENCY OF THE THIN FILM PEROVSKITE SOLAR CELLS.

Y.B. Martynov<sup>1</sup>, R.G. Nazmitdinov<sup>2</sup>, R. Pujol-Nadal<sup>3</sup>, F. Bonnin-Ripoll<sup>3</sup>

<sup>1</sup> State Scientific-Production Enterprise “Istok”, Fryazino, Russia

<sup>2</sup> Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

<sup>3</sup> Departament de Física, Universitat de les Illes Balears, Palma de Mallorca, Spain

yaroslavmartynov@yandex.ru

With combined the numerical solution of the charge transport equations and the Monte-Carlo ray tracing simulations complemented by the transfer-matrix method the structure of organometallic halide perovskite solar cells (PSCs) was optimized in order to reach a maximum power conversion efficiency (PCE) of the element with different absorber purity [1]. The positive role of Lambertian photon scattering on the back reflector as well as the negative role of charge generation in the hole-transport material (HTM) were pointed out [2SolMat,3]. We compare the PSC properties with wide and narrow band gap HTMs with various organic and inorganic materials. PSCs with wide band gap HTMs has higher efficiencies in spite of the fact that narrow band gap HTM PSCs has higher total absorption. This is due to an excessive non-radiative recombination in highly doped HTM layer. Our analysis demonstrates that at the moderate absorber purity (the diffusion length  $\sim 1\ \mu\text{m}$ ) the optimal thickness of the solar cell with the typical absorber  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  is  $\sim 300\ \text{nm}$ , providing the maximal efficiency  $\sim 18.8\%$  for the wide band gap HTM (CuSCN).

### References

- [1] Y.B. Martynov, R.G. Nazmitdinov, A. Moia-Pol, P.P. Gladyshev, A.R. Tameev, A.V. Vannikov, M. Pudlak *On the efficiency limit of  $\text{ZnO}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{CuI}$  perovskite solar cells*. Phys.Chem.Chem.Phys., **19**, 19916-19921 (2017)
- [2] F. Bonnin-Ripoll, Y.B. Martynov, G. Cardona, R.G. Nazmitdinov, R. Pujol-Nadal *Synergy of the ray tracing+carrier transport approach: On efficiency of perovskite solar cells with a back reflector* Solar Energy Materials and Solar Cells, **200** 110050 (2019)
- [3] F. Bonnin-Ripoll, Y.B. Martynov, R.G. Nazmitdinov, G. Cardona and R. Pujol-Nadal *On the efficiency of perovskite solar cells with a back reflector: effect of a hole transport material*, Phys. Chem. Chem. Phys., **23**, 26250–26262 (2021)

## QUANTUM-QUASICLASSICAL APPROACH FOR FEW-BODY PROBLEMS IN PHYSICS

V. S. Melezhik<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region, Russian Federation*

<sup>2</sup>*Dubna State University, Dubna, Moscow Region, Russian Federation*

*E-mail: melezhik@theor.jinr.ru*

We discuss the efficient quantum-quasiclassical method developed by V.S. Melezhik with co-authors [1-4], which has been successfully applied to calculate various few-body processes and has made it possible to resolve a number of topical problems in atomic [1,3-5], mesoatomic [2], and nuclear physics [6]. In this approach, a few-body quantum problem is reduced to the simultaneous integration of a system of coupled quantum and classical equations: the time-dependent Schrödinger equation, which describes the quantum dynamics of slow light particles, and the classical Hamilton equations, describing the fast variables of heavy particles.

Recently [5], the approach was extended and adapted for quantitative description of pair collisions of light slow Li atoms with heavy Yb<sup>+</sup> ions in the confined geometry of the hybrid atom-ion trap. On the basis of these calculations, a new method for sympathetic cooling of ions in a RF Paul trap was proposed: to use cold buffer atoms for this purpose in the region of atom-ion confinement-induced resonance [5].

This approach also made it possible to perform calculations of the breakup cross sections into the low-energy region (up to 10 MeV/nucleon), inaccessible so far to other methods, for the <sup>11</sup>Be breakup on a heavy target [6].

The developed quantum-quasiclassical method opens new possibilities in the investigation of other hot few-body quantum systems.

### **References**

- [1] V.S. Melezhik and P. Schmelcher, *Quantum Energy Flow in Atomic Ions Moving in Magnetic Fields*. Phys. Rev. Lett. **84**, 1870 (2000)
- [2] V.S. Melezhik, *Recent Progress in Treatment of Sticking and Stripping with Time-Dependent Approach*. Hyperfine Int. **138**, 351 (2001)
- [3] V.S. Melezhik, J.S. Cohen, and C.Y. Hu, *Stripping and excitation in collisions between p and He<sup>+</sup> (n<3) calculated by a quantum time-dependent approach with semiclassical trajectories*. Phys. Rev. **A69**, 032709 (2004)
- [4] V.S. Melezhik and L.A. Sevastianov, *Quantum-Semiclassical Calculation of Transition Probabilities in Antiproton Collisions with Helium Ions*. Lecture Notes in Comp. Sci. **10684**, 449 (2017).
- [5] V.S. Melezhik, *Improving efficiency of sympathetic cooling in atom-ion and atom-atom confined collisions*. Phys. Rev. **A103**, 053109 (2021)
- [6] D.Valiolda, D.Jansejov, and V.S Melezhik, *Investigation of low-lying resonances*

*in breakup of halo nuclei within the time-dependent approach.* The European Phys. J.  
**A58**, 34 (2022)

**RENORMALIZATION ANALYSIS OF THE VISCOSITY  
COEFFICIENT ON THE VICINITY OF SUPERFLUID PHASE  
TRANSITION**

**D. Davletbaeva<sup>1</sup>, M. Hnatič<sup>2,3,4</sup>, M. V. Komarova<sup>1</sup>,  
T. Lučivjanský<sup>3</sup>, L. Mizišin<sup>2</sup>, M. Yu. Nalimov<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>. *Department of Theoretical Physics, St. Petersburg University,  
Ulyanovskaya 1, St. Petersburg, Petrodvorets 198504, Russia*

<sup>2</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear  
Research, 141980 Dubna, Moscow Region, Russia*

<sup>3</sup>*Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 041 54  
Košice, Slovakia*

<sup>4</sup>*Institute of Experimental Physics SAS, Watsonova 47, 040 01 Košice,  
Slovakia*

*mizisin@theor.jinr.ru*

The superfluid phase transition is characterized by a disappearance of viscosity and arising a turbulent fluctuations, which is traditionally described by phenomenological models E and F of critical dynamics. However, considering the compressibility of the fluid near phase transition effectively leads to a reduction in the simple stochastic model A. This fact makes it possible to analytically investigate the behavior of a damping of the viscosity coefficient. To study this problem, we employ the methods of field-theoretic renormalization group, and the analysis is performed utilizing the perturbative  $\varepsilon$ -expansion. The critical exponent of viscosity is expressed via critical dimensions of composite operators (CO) of two-component model A with the canonical dimensions 2,4,6 and 8. We carried out renormalization analysis for all aforementioned operators and calculated the matrices of renormalization constants and critical dimensions of CO with canonical dimension 8 in the first order of the perturbation theory.



## МАГНИТНЫЕ КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ВНУТРИСЛОЕВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ МЕТАЛЛАХ

Т. И. Могилёв<sup>1</sup>, П. Д. Григорьев<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

<sup>2</sup>ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия

<sup>3</sup>НИТУ «МИСИС», Москва, Россия

*Staras@mail.ru*

Мы находим выражения для холловской внутрислойной проводимости в квазидвумерных металлах, описывающие её квантовые и медленные осцилляции в магнитном поле. С учётом ранее выведенных выражений для диагональной компоненты тензора проводимости [1], получены выражения для тензора магнетосопротивления. Данная работа наконец закрывает вопрос вычисления трёхмерного тензора магнетосопротивления вкуче с работами [1, 2].

В расчёте используется самосогласованное борновское приближение. Примеси считаются точечными и случайно разбросанными по объёму квазидвумерного металла. Для вычисления холловской проводимости применяется формула Смрчка-Стреды [3].

Вопрос вычисления магнитных квантовых и медленных осцилляций магнетосопротивления имеет большое практическое значение для анализа многочисленных экспериментов.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 21-52-12027.

### **References**

- [1] T. I. Mogilyuk and P. D. Grigoriev, Magnetic oscillations of in-plane conductivity in quasi-two-dimensional metals, *Phys. Rev. B*, 98, 045118 (2018).
- [2] P. D. Grigoriev, *Phys. Rev. B*, 67, Theory of the Shubnikov–de Haas effect in quasi-two-dimensional metals, 144401 (2003).
- [3] P. Streda, *J. Phys. C: Solid State Phys., Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions*, 15, L717 (1982).

# Критическая динамика фазового перехода в сверхтекучее состояние.

Молотков Ю.Г.<sup>1,\*</sup>, Хонконен Ю.<sup>2,+</sup>, Налимов М.Ю.<sup>1,3,></sup>,  
Комарова М.В.<sup>3</sup> и Треногин А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research,  
6 Joliot-Curie, Dubna, Moscow region, 141980, Russia

<sup>2</sup>Department of Military Technology, National Defence University, Santahaminantie  
2, 00860 Helsinki, Finland

<sup>3</sup>Saint-Petersburg State University, 7/9 Universitetskaya Emb., St Petersburg  
199034, Russia

\*molotkov@theor.jinr.ru

+Juha.Honkonen@mil.fi

>m.nalimov@spbu.ru

Задача исследования перехода в сверхтекучее состояние имеет долгую историю. Недавно было показано, что модели, предложенные для описания этого перехода, а именно модели  $F, E$  стохастической динамики при учете сжимаемости жидкости эффективно редуцируются к более простой модели  $A$  стохастической динамики. С другой стороны, описание данного перехода в формализме временных функций Грина при конечной температуре также привело к модели, эквивалентной модели  $A$ . Динамический критический индекс  $z$ , отвечающий за убывание времени релаксации системы, выведенной из равновесия флуктуациями, оказывается равен индексу  $z$  из модели  $A$ . Однако вопрос устойчивости найденной ИК фиксированной точки в модели временных функций Грина при конечной температуре не может быть сведен к вопросу устойчивости в модели  $A$ , что потребовало отдельного вычисления собственных чисел матрицы  $\omega$  ответственных за устойчивость. В силу того, что ряды по  $\epsilon$  для собственных чисел оказываются асимптотическими, было проведено пересуммирование получающихся рядов. В докладе будет кратко изложен формализм временных функций Грина при конечной температуре, приведены результаты вычисления  $z$  индекса в 2х петлях и устойчивости единственной ИК фиксированной точки в 3х петлях.

1. J. Honkonen, M. V. Komarova, Y. G. Molotkov, and M. Y. Nalimov, Nucl. Phys. B 939, 105 (2019)
2. Y. A. Zhavoronkov, M. V. Komarova, Y. G. Molotkov, M. Y. Nalimov, and J. Honkonen, Theor. Math. Phys. 200, 1237–1251 (2019).
3. J. Honkonen, M. V. Komarova, Y. G. Molotkov, and M. Y. Nalimov, Theor. Math. Phys. 200, 1360 (2019).
4. J. Honkonen, M. V. Komarova, Y. G. Molotkov, M. Y. Nalimov, and Y. A. Zhavoronkov, EPJ Web of Conferences 226, 01005 (2020)
5. J. Honkonen, M. Komarova, Yu. Molotkov, M. Nalimov, and A. Trenogin Phys. Rev. E 106, 014126 (2022)

## МЕЖПОДЗОННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ В КРЕСЕЛЬНОЙ ЛЕНТЕ ГРАФЕНА В ПОЛЕ БИХРОМАТИЧЕСКОЙ СВЕТОВОЙ ВОЛНЫ

Б.С. Монозон<sup>1</sup>, Т.А. Федорова<sup>1</sup>, П. Шмельхер<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Санкт Петербургский государственный морской технический университет,  
Санкт Петербург, Россия

<sup>2</sup>Центр оптических квантовых технологий, университет Гамбурга, Гамбург,  
Германия

*borismonozon@mail.ru*

Рассматривается лента графена кресельного типа нанометровой ширины  $d$  в электрическом поле бихроматической волны  $\vec{F}(t) = \vec{F}_0 \cos \omega_0 t + \vec{F}_1 \cos \omega_1 t$ , являющемся суперпозицией сильного низкочастотного и возмущающего высокочастотного полей ( $F_0 \gg F_1$ ,  $\omega_0 < \omega_1$ ) с амплитудами  $F_{0,1}$  и частотами  $\omega_{0,1}$ , соответственно. Оба поля поляризованы параллельно оси ленты. Аналитически исследуется вероятность межподзонного перехода  $w_N^{(l')}$  между дырочной и электронной  $N$ -ми подзонами. Переход индуцирован совместным действием обоих полей с участием  $l'$  фотонов частоты  $\omega_0$  и фотона с частотой  $\omega_1$ .

Математический подход основан на нестационарном уравнении Дирака для электрона, движущегося со скоростью Ферми  $v_F$  в поле двух волн  $\vec{F}(t)$  в двух подрешетках ленты графена и в двух долинах, относящихся к двум неэквивалентным точкам Дирака в импульсном пространстве [1]. Согласно решения этого уравнения в резонансном приближении вероятность межподзонного перехода  $w_N^{(l')}(t)$  осциллирует во времени с частотой Раби  $\Omega_{Nl'}^{(R)}(F_0, F_1, \omega, d)$ . Установлена её зависимость от четности числа фотонов  $l'$ , напряженностей полей  $F_{0,1}$  и ширины ленты  $d$ . Показано, что при определенном условии слабая волна вызывает увеличение частоты Раби. Оценки, сделанные для реалистических интенсивностей световых полей и ширин лент, находятся в полном соответствии с данными по осцилляциям Раби в слое графена в поле бихроматической электромагнитной волны [2].

### References

- [1] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, Phys. Rev. **71**, 622 (1947)
- [2] I. Akal, S. Villaba-Chavez, and C. Muller, *Electron-positron pair production in a bifrequent oscillating electric field*, Phys. Rev. D **90**, 113004 (2014)

**ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА КУПАТНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ,  
СФОРМИРОВАННАЯ КОРРЕЛЯЦИЯМИ НОСИТЕЛЕЙ,  
ОПОСРЕДОВАННЫМИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ**

**А.Э. Мясникова, С.В. Доронкина, Р.Р. Арутюнян, А.Х. Джантемиров**

*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия*

*myasnikova67@yandex.ru, Web-сайт*

Фазовая диаграмма дырочно-допированных купратных сверхпроводников демонстрирует множество фаз, среди которых псевдощелевая, зарядовоупорядоченная (ЗУ), сверхпроводящая фазы, фазы с малой электронной и большой дырочной поверхностью Ферми, фазы с плотностью носителей, пропорциональной уровню допирования  $p$  и  $p+1$ . Считалось, что первые две фазы конкурируют с третьей, но одинаковое поведение их критических температур как функций допирования указывает на их общую природу [1]. В ЗУ фазе наблюдается большая замороженная деформация решетки [2]. При наличии дискретного уровня носителя в поляризационной потенциальной яме его основным состоянием является автолокализованное, ЗУ в таких системах образовано биполярной жидкостью, сосуществующей при высоком допировании/температуре с делокализованными носителями [3].

Для построения фазовой диаграммы такой системы минимизируется ее свободная энергия относительно размера биполярона при использовании функции распределения для системы сосуществующих локализованных и делокализованных носителей. Для расчета температуры Бозе-конденсации биполяронной жидкости использован стандартный метод теории Бозе-жидкости Ландау и спектр возбуждений биполяронной жидкости. Полученная фазовая диаграмма демонстрирует все перечисленные выше фазы, их место на диаграмме совпадает с таковым в купратах, как и рассчитанная зависимость постоянной Холла рассматриваемой системы от температуры и допирования.

**References**

- [1] B. Loret et al., Intimate link between charge density wave, pseudogap and superconducting energy scales in cuprates, *Nature Physics* **15**, 771–775 (2019).
- [2] E.M. Forgan et al., The microscopic structure of charge density waves in underdoped YBCO revealed by X-ray diffraction, *Nat. Comm.* **6**, 10064 (2015).
- [3] A. E. Myasnikova et al., Strong long-range electron–phonon interaction as possible driving force for charge ordering in cuprates, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 235602 (2019).

## СПИНОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В ЛАТЕРАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

Р.Г. Назмитдинов<sup>1</sup>, К.Н. Пичугин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*ОИЯИ, 141980 Дубна Московской области, Россия*

<sup>2</sup>*Киренский Институт физики СОРАН, 660036 Красноярск, Россия*  
*rashid@theor.jinr.ru*

Получение спин-поляризованного тока является одной из актуальных задач теоретической и экспериментальной физики наносистем [1]. В частности, инверсия спиновой поляризации необходима для функционирования логических элементов квантовых компьютеров. Генерация и эффективные операции со спин-поляризованным током в полупроводниковых структурах без использования внешнего магнитного поля предъявляют важные требования к принципам функционирования таких элементов. Спин-орбитальное взаимодействие типа Бычкова-Рашбы (СОВ) [2], обусловленное инверсной асимметрией слоистых гетероструктур, представляет собой естественный механизм манипуляции спином электрона. Инвариантность СОВ по отношению к обращению времени ведет к вырождению Крамерса. Как результат, в циркулярной квантовой точке существуют двукратно вырожденные состояния по знаку углового момента, для которых угловой момент состояния является хорошим квантовым числом. Используя данный факт, в случае баллистического переноса электронов через циркулярную квантовую точку посредством квантовых контактов в данном сообщении обсуждаются: а) оптимальные условия реализации процесса инверсии спина электрона [3]; физические принципы разделения электронов по спину через различные каналы переноса [4].

### Список литературы

- [1] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, I. Zutic, *Acta Physica Slovaca* **57**, 565 (2007).
- [2] Y.A. Bychkov, E.I. Rashba, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [3] K.N. Pichugin, A. Puente, R.G. Nazmitdinov, *Symmetry* **12**, 2043 (2020).
- [4] K.N. Pichugin, R.G. Nazmitdinov, to be published.

**THE DIFFERENCE BETWEEN THE QUANTUM FIELD  
THEORY METHODS APPLICATION IN THE STATISTICAL  
PHYSICS AND PARTICLE PHYSICS.**

**M. Nalimov<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia  
myunalimov@gmail.com*

It is known that the rotation to the Euclidean space turns quantum field theory into an equilibrium statistical physics.

Quantum particle field theory is based on unitarity of the S-matrix, Lorentz invariance and renormalizability. Quantum statistical theory uses largely similar methods. But in the submitted polemical report will be presented discrepancies within the framework of equilibrium statistical physics with the mentioned basic principles of elementary particle physics.

Formal Wick rotation is subject to verification for each specific model, as the classics wrote. This check may turn out to be non-trivial, for example, the rotation of a free oscillatory model does not lead to the Bose-Einstein distribution (Planck for a black body).

An rotated equilibrium theory presupposes a heat bassin, the theory is not closed, an analog of unitarity violation is the appearance of dissipation without any additional physical properties of a heat bassin.

To describe specific phenomena of statistical physics (for example, critical behavior) the model in question need not be neither Lorentz invariant nor renormalizable.

## STRONG REPULSIVE INTERSPECIES INTERACTION EFFECTS IN TWO-COMPONENT BOSE MIXTURE

Z.A. Narzikulov<sup>1</sup>, T. Abdurakhmonov<sup>2</sup>, A. Rakhimov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of nuclear physics, Tashkent, Uzbekistan*

<sup>2</sup>*University of Rostock, Rostock D-18059, Germany*

*zabardastn@gmail.com*

We have developed a self-consistent mean-field theory for a binary homogeneous mixture of two-component Bose systems. This theory, being conserving and gapless, imposes no restriction on the gas parameter  $\gamma$ , and hence it is valid for arbitrary strong interactions  $g_{ab}$ . The theory satisfies the generalized HP theorem and takes into account anomalous densities  $\sigma_a$ ,  $\sigma_b$ , and  $\sigma_{ab}$ . The presented approach is a kind of a self-consistent Hartree-Fock-Bogoliubov approximation; hence it is the most general mean-field approximation.

We have obtained the phase diagram for this system at zero as well as at finite temperatures for arbitrary gas parameters. The phase diagram at zero temperature on the  $(g_{ab}, \gamma)$  plane shows that the system may remain stable and miscible even at  $g_{ab}/g_{aa} > 1$ , provided the anomalous densities are properly taken into account. Comparing this phase diagram with that at finite temperature  $(g_{ab}, \gamma, T)$ , we see that the finite temperature can transform the phase-separated two-component BECs at  $T=0$  to a miscible state. This conclusion is in good agreement with the works by Roy et al. [1], Ota et al. [2], and Shi et al. [3]. Our numerical results are also in good agreement with experimental works [4], although new experimental measurements for larger values of the interspecies coupling and  $\gamma$  are required.

### **References**

- [1] A. Roy and D. Angom, *Thermal suppression of phase separation in condensate mixtures*, Phys. Rev. A **92**, 011601(R) (2015).
- [2] M. Ota and S. Giorgini, *Thermodynamics of dilute Bose gases: Beyond mean-field theory for binary mixtures of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rev. A **102**, 063303 (2020).
- [3] H. Shi, W. M. Zheng, and S. T. Chui, *Phase separation of Bose gases at finite temperature*, Phys. Rev. A **61**, 063613 (2000).
- [4] J. H. Kim, D. Hong, and Y. Shin, *Observation of two sound modes in a binary superfluid gas*, Phys.Rev. A **101**, 061601(R) (2020).

## Manipulation of Magnetic Moment Dynamics in Nanomagnet Coupled to Josephson Junction.

M. Nashaat<sup>1,2</sup>, K. V. Kulikov<sup>1,3</sup>, and Yu. M. Shukrinov<sup>1,3,4</sup>

<sup>1</sup>*BLTP, JINR, Dubna, Moscow Region, 141980, Russia*

<sup>2</sup>*Department of Physics, Faculty of Science, Cairo University, 12613, Giza,  
Egypt*

<sup>3</sup>*Dubna State University, Dubna, Moscow Region, Russia*

<sup>4</sup>*Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, 141700, Russia*  
*majednas@theor.jinr.ru, <https://pin.jinr.ru/pin/pin?c=top&pp=41179>*

The anomalous Josephson structures with coupled superconducting and magnetic characteristics allows the manipulation of magnetic properties by Josephson current [1]. We investigate the effect of electromagnetic coupling in nanomagnet - Josephson junction system [2, 3]. We show that the magnetic field generated by the Josephson junction and external drive plays the role of the oscillating force of the suspension point in the Kapitza pendulum [3]. We demonstrate that at ferromagnetic resonance, an irregular easy axis reorientation occurs due to several precessional motions that are related to chaotic behavior and orbits with different periodicity in the ferromagnetic resonance region [4]. This opens unique perspectives for the manipulation of magnetic moment in hybrid superconducting systems and spintronics devices.

### **References**

- [1] Yu. M. Shukrinov 2022 Phys.-Usp. **65**, 317 (2022).
- [2] L. Cai and E. M. Chudnovsky, Phys. Rev. B **82**, 104429 (2010).
- [3] K. V. Kulikov, D. V. Anghel, A. T. Preda, M. Nashaat, M. Sameh, and Yu. M. Shukrinov, Phys. Rev. B **105**, 094421 (2022).
- [4] M. Nashaat, M. Sameh, A. E. Botha, K. V. Kulikov, Yu. M. Shukrinov (In press Chaos 2022).



## НАНОСТРУКТУРЫ В ОБЛУЧЕННЫХ ПЛЕНКАХ ПОДВЕШЕННОГО CVD-МУЛЬТИГРАФЕНА

Н.А. Небогатикова<sup>1</sup>, И.В. Антонова<sup>1,2</sup>, А.К. Гутаковский<sup>1</sup>, Д.В. Смовж<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия*

<sup>2</sup>*Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

<sup>3</sup>*Институт теплофизики СО РАН, Новосибирск, Россия*

[nadonebo@gmail.com](mailto:nadonebo@gmail.com), <https://orcid.org/0000-0002-5917-9709>

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию пленок CVD-мультиграфена, наноструктурированных путем облучения быстрыми тяжелыми ионами (Xe ксенон, энергии ионов 167 либо 26 МэВ (электронные потери  $S_e \sim 17.3$  и 8 кэВ/нм, соответственно). Ранее нами было обнаружено, что в отсутствие подложки наноструктурирование пленок CVD-графена происходит наиболее эффективно [1]. В ходе данной работы нами были исследованы подвешенные пленки CVD-графена.

В облученных пленках были обнаружены наноструктурированные области размерами с различными межслойными расстояниями, зависящими от начальной энергии облучающих ионов. При энергии ионов 167 МэВ в облученных CVD-пленках преобладают наноструктуры с межплоскостными расстояниями 0.19-0.22 нм, наличием осей 5-го порядка и характерными размерами 7-16 нм. Подобные образования характерны для метеоритов либо детонационных алмазов. При облучении с энергией ионов 26 МэВ характерно преобладание межплоскостных расстояний в наноструктурированных областях  $\sim 0.24$ -0.27 нм, наличие осей 4-го порядка и характерные размеры  $\sim 8$ -24 нм. Такие области могут быть интерпретированы как кристаллиты графена с AA'-упаковкой слоев. Таким образом, показано, что изменяя количество энергии, передаваемой от ионов материалу, можно значительно влиять на характер наноструктурирования материала вблизи треков ионов.

Работа выполнена в рамках проекта РНФ 22-19-00191.

### **References**

- [1] I.V. Antonova, N.A. Nebogatikova, S.V. Erohin, V.A. Prenas, D.V. Smovzh, E.A. Suprun, V.A. Volodin, A. Olejniczak and P.B. Sorokin *Nanostructuring of CVD graphene by high-energy heavy ions*. Name of Journal, **123**, 108880 (2022)

## MAGNETICALLY CONTROLLED HELICAL CRYSTALS

**R.A. Niyazov<sup>1,2</sup>, D.N. Aristov<sup>2,1</sup>, V.Yu. Kachorovskii<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

<sup>2</sup>*NRC "Kurchatov Institute", Petersburg Nuclear Physics Institute, Gatchina, Russia*

<sup>3</sup>*A. F. Ioffe Physico-Technical Institute, St. Petersburg, Russia*

*E-mail: r.niyazov@spbu.ru*

We study electron transport in an array of tunnel-coupled edge states arising in a set of ordered antidots in a two-dimensional topological insulator. Similar systems are already being studied experimentally [1].

The band structure of a one-dimensional crystal of such antidots was calculated as a function of the magnetic flux. It is shown that the energy levels of an individual antidot are broadened proportional to the tunnel coupling between them. They are periodic  $\varepsilon_{n+2}^{\pm} = \varepsilon_n^{\pm} + 4\pi$  and have the property  $\varepsilon_{n+1}^{\pm}(q + \pi) = \varepsilon_n^{\pm}(q) + 2\pi$  (see Figure).

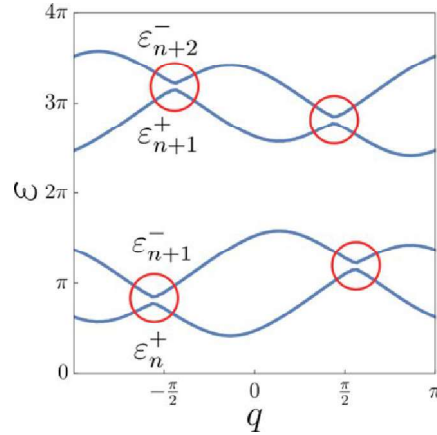
The band gaps arise. They are closed when the magnetic flux is equal to the integer and half-integer value of the magnetic flux quantum. With an increase in the deviation of the magnetic flux from these values, the Dirac points merge. The width of the band gaps is related to the difference between the quantization axes of electron spins in neighboring antidots.

Defects in such a crystal are studied. For example, a defect in the form of a wall between the region of rings with a large radius and rings with a small one leads to the formation of a localized topological state with an energy equal to the middle of the band gap.

RFBR, project number 19-32-60077, funded the work of R.A.N. The Russian Science Foundation funded the work of D.N.A. and V.Yu.K., Grant No. 20-12-00147.

### References

- [1] J. Ziegler, *Quantum transport in HgTe topological insulator nanostructures*, PhD thesis, Universität Regensburg (2019).



## SHOT NOISE IN AHARONOV-BOHM INTERFEROMETERS

**R.A. Niyazov<sup>1,2</sup>, I.V. Krainov<sup>3</sup>, D.N. Aristov<sup>2,1</sup>, V.Yu. Kachorovskii<sup>3</sup>**

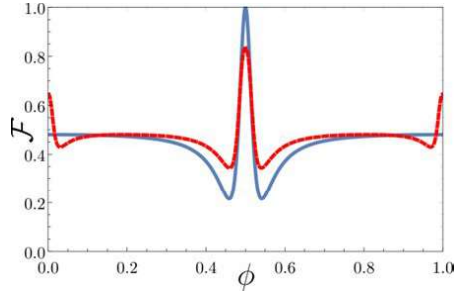
<sup>1</sup>*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

<sup>2</sup>*NRC "Kurchatov Institute", Petersburg Nuclear Physics Institute, Gatchina, Russia*

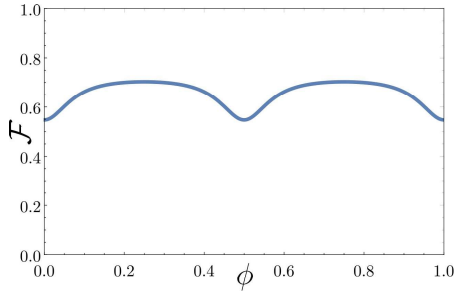
<sup>3</sup>*A. F. Ioffe Physico-Technical Institute, St. Petersburg, Russia*

*E-mail: r.niyazov@spbu.ru*

We studied the dependence of the Fano factor of Aharonov-Bohm interferometers on the magnetic field. The Fano factor was calculated for the "ordinary" material. The dependence of the Fano factor on the magnetic flux in units of a flux quantum has a peak in half-integer values for symmetric interferometer arms and two peaks otherwise (see upper Figure).



Further, we considered two-dimensional topological insulators (2D TIs). They are naturally quantum interferometers if metal electrodes are attached to them. Experimental measurement of the Fano factor for the edge states of 2D TI gives the value  $F=0.29$ , which still does not have a good enough explanation [1]. The shot noise is calculated, the analysis of the obtained expression and its dependence on the magnetic flux is carried out (see lower Figure). The relative length of the arms does not affect the interference, and at half-integer values of the flux, antiresonances occur.



The study was funded by the Russian Federation President Grant No. MK-2918.2022.1.2 (R.A.N.). The Russian Science Foundation funded the work of D.N.A. and V.Yu.K., Grant No. 20-12-00147.

### References

- [1] S. U. Piatrusha, L. V. Ginzburg, E. S. Tikhonov, D. V. Shovkun, G. Koblmüller, A. V. Bubis, A. K. Grebenko, A. G. Nasibulin, and V. S. Khrapai, *Noise Insights into Electronic Transport*, JETP Lett. , 108, 1, 71-83 (2018)

# RENORMALIZATION GROUP DESCRIPTION OF THE HIGH-TEMPERATURE SUPERCONDUCTING PHASE TRANSITION

M. Yu. Nalimov <sup>1,2</sup>, A. V. Ovsiannikov<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Department of Statistical Physics, Faculty of Physics, St. Petersburg University, 7/9 Universitetskaya nab., St. Petersburg 199034, Russia*

<sup>2</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, 6 Joliot-Curie, Dubna, Moscow region, 141980, Russia*

<sup>3</sup>*Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovakia*  
*E-mail addresses: m.nalimov@spbu.ru (M. Yu. Nalimov),*  
*ovsiannikov.andre@gmail.com (A. V. Ovsiannikov)*

A five-loop renormalization group analysis of the effective high-temperature superconducting phase transition model [1, 2, 3, 4] with two coupling constants is considered with the aid of the convergent perturbation theory formalism [5, 6, 7, 8]. The specific features of the renormalization group analysis when using convergent perturbation theory series instead of traditional divergent ones are shown. The fact that all initial states of all superconductors with a high-temperature first-order phase transition lie on the same curve in the phase plane of the coupling constants of the model is discussed. A system of integral equations that connects the points on this curve and the physical parameters of the model (temperature, attractive interaction constant, cutoff parameter, and Fermi energy) is obtained.

## References

- [1] M.V. Komarova et al, *Theoret. Math. Phys.*, **176**, 906–912, 2013.
- [2] G.A. Kalagov et al, *Theoret. Math. Phys.*, **181**, 1448–1458, 2014.
- [3] G.A. Kalagov et al, *Nuclear Physics B*, **905**, 16–44, 2016.
- [4] M. Nalimov et al, *Theoret. and Math. Phys.*, **204**, 1033–1045, 2020.
- [5] A. G. Ushveridze, *Soviet J. Nuclear Phys.*, **38**, 475–480, 1984.
- [6] B. S. Shaverdyan et al, *Physics Letters B*, **123**, 316–318, 1983.
- [7] J. Honkonen et al, *Physics Letters B*, **459**, 582–588, 1999.
- [8] J. Honkonen et al, *Acta Physica Slovaca*, **52**, 4, 303, 2002.

## NOVEL METHODS FOR PREDICTING EXOTIC COMPOUNDS AND NEW MATERIALS

A.R. Oganov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Skolkovo Institute of Science and Technology, 30 bldg. 1 Bolshoy blvd., 121205 Moscow, Russia

[a.oganov@skoltech.ru](mailto:a.oganov@skoltech.ru), <https://uspex-team.org>

Until mid-2000s it was thought that crystal structures are fundamentally unpredictable. This has changed, and a special role in this transformation was played by our evolutionary method USPEX [1]. This method routinely allows one to predict stable crystal structures for a given chemical composition and predict all stable compounds formed by given elements. Here I will discuss:

\*Discovery of novel chemical phenomena at high pressure: transparent non-metallic allotrope of sodium [2], counterintuitive novel sodium chlorides [3], chemical reactivity of helium [4], prediction and discovery of new high-temperature superconducting polyhydrides [5,6], approaching room-temperature superconductivity.

\*\*Recent extension of crystal structure prediction to finite temperature [7], and first results for planet-forming materials.

\*\*\*Development of coevolutionary methods – COPEX (to predict all stable compounds in very complex systems) [8] and Mendelevian search (navigating the chemical space to find the material with desired properties) [9].

### References

- [1] Oganov A.R., Glass C.W. (2006). Crystal structure prediction using ab initio evolutionary techniques: principles and applications. *J. Chem. Phys.* **124**, 244704.
- [2] Ma Y. et al. (2009). Transparent dense sodium. *Nature* **458**, 182-185.
- [3] Zhang W.W. et al. (2013). Unexpected stoichiometries of stable sodium chlorides. *Science* **342**, 1502-1505.
- [4] Dong X. et al. (2017). A stable compound of helium and sodium at high pressure. *Nature Chemistry* **9**, 440-445.
- [5] Troyan I.A. et al. (2021). Anomalous high-temperature superconductivity in YH<sub>6</sub>. *Advanced Materials*, article 2006832.
- [6] Semenok D.V. et al. (2021). Superconductivity at 253 K in lanthanum–yttrium ternary hydrides. *Materials Today* **48**, 18-28.
- [7] Kruglov I.A., Yanilkin A.V., Propad Y., Oganov A.R. (2021). Crystal structure prediction at finite temperatures. Submitted.
- [8] Liu X., Niu H., Oganov A.R. (2021). COPEX: co-evolutionary crystal structure prediction algorithm for complex systems. *npj Comp. Mater.* **7**, 199.
- [9] Allahyari Z., Oganov A.R. (2020). Coevolutionary search for optimal materials in the space of all possible compounds. *NPJ Computational Materials* **5**, 55.

**LOGARITHMIC NEGATIVITY IN THE 1D  
ANTIFERROMAGNETIC SPIN 1 HEISENBERG MODEL  
WITH SINGLE-ION ANISOTROPY**

**G. Gori<sup>1</sup>, V. V. Papoyan (Jr.)<sup>2</sup>, V. V. Papoyan<sup>3</sup>, A. Trombettoni<sup>4</sup>,  
and N. Ananikian<sup>5</sup>**

<sup>1</sup>*CNR-IOM DEMOCRITOS Simulation Center, Via Bonomea 265, I-34136  
Trieste, Italy*

<sup>2</sup>*Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for Nuclear  
Research, 141980 Dubna, Russian Federation*

<sup>3</sup>*Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research,  
141980 Dubna, Russian Federation*

<sup>4</sup>*Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), I-34136  
Trieste, Italy*

<sup>5</sup>*National Science Laboratory, Alikhanian Br. 2, 0036 Yerevan, Armenia  
and CANDLE Synchrotron Research Institute, Acharyan 31, 0040 Yerevan,  
Armenia*

*vpap@theor.jinr.ru*

Entanglement in 1D antiferromagnetic spin 1 Heisenberg XXX model with external magnetic field  $B$  and single-ion anisotropy  $D$  is investigated. The logarithmic negativity for nearest and non-nearest neighbors on the finite chain with sizes  $N = 4 - 8$  in the ground state is obtained. The phase diagram is presented for even  $N$  sizes in the  $B - D$  plane, and a specific triple point is demonstrated. The behavior of logarithmic negativity  $LN$  on a finite chain with sizes  $N = 4 - 8$  for nearest, next nearest and next to next nearest neighbors depending on external magnetic field  $B$  and single-ion anisotropy  $D$  is considered at low temperatures. We also discussed the properties of the logarithmic negativity of  $LN$  as a function of temperature  $T$  at an external magnetic field and for a fixed single-ion anisotropy.

## ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНАЯ ЖИДКОСТЬ В МОНОСЛОЯХ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

П.Л. Пех<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Физический Институт им. П.Н.Лебеева, Москва, Россия

*pavel.pekh@phystech.edu*

В последнее время большой интерес представляют монослои дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ) [1]. Квазидвумерная природа носителей тока, электронов и дырок, в ДПМ обеспечивает более сильное взаимодействие по сравнению с объемными полупроводниками. Так в монослое MoS<sub>2</sub> наблюдалась сильно связанная электронно-дырочная жидкость (ЭДЖ) с критической температурой  $T=500$  К [2].

Энергия основного состояния на одну электронно-дырочную пару складывается из энергии Хартри-Фока и корреляционной энергии. В [3] вычисляется корреляционная энергия в разных приближениях: асимптотический метод в рамках RPA и по методу Нозьера-Пайнса. По минимуму полной энергии определяются энергия и плотность ЭДЖ при нулевой температуре.

Химический потенциал можно представить в виде суммы хим.потенциала идеального электронно-дырочного газа и хим.потенциала обменно-корреляционной части при нулевой температуре. В [4] вычисляется фазовая диаграмма ЭДЖ, которая представляет собой “колокол” перехода газ-жидкость.

### **References**

- [1] Л.А. Чернотанский, А.А. Артюх. Квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов: структура, синтез, свойства и применение. УФН, т. **188**, с. 3(2018).
- [2] Yiking Yu et.al. Room-Temperature Electron-Hole Liquid in Monolayer MoS<sub>2</sub>. ACS Nano, V. 13, Is. 9, p. 10351(2019).
- [3] П.Л. Пех, П.В. Ратников, А.П. Силин. Электронно-дырочная жидкость в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов. Письма в ЖЭТФ, т. 111, в. 2, с. 80 (2020).
- [4] П.Л. Пех, П.В. Ратников, А.П. Силин. Фазовая диаграмма электронно-дырочной жидкости в монослойных гетероструктурах на основе дихалькогенидов переходных металлов. Письма в ЖЭТФ, т. 160, в. 4, с. 572 (2021).

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАНТОВАННЫХ ПОЛЕЙ С ПРОТЯЖЕННЫМ МАТЕРИАЛЬНЫМ ОБЪЕКТОМ

Ю.М. Письмак<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, Ульяновская 1, Петергоф, 198504, Санкт-Петербург  
y.pismak@spbu.ru, <http://hep.spbu.ru/index.php/ru/>

Предлагается подход К. Симанзика [1] к моделированию квантово-полевых систем в неоднородном пространстве-времени использовать для теоретического исследования эффектов взаимодействия квантованных полей с материей. Как известно, учет базисных физических принципов существенно ограничивает возможности построения теории элементарных частиц. Так требования локальности, перенормируемости, релятивистской и калибровочной инвариантности оказываются достаточными для того, чтобы найти общий вид функционала действия квантовой электродинамики (КЭД) с точностью до значений двух его параметров, массы и заряда электрона. Пространство-время в КЭД предполагается однородным и изотропным, однако оказывается возможным [1] модифицировать КЭД добавкой к действию дополнительного функционала действия (действие дефекта), для которого это условие не выполняется, но перенормируемость и калибровочная инвариантность при этом сохраняются. Используя действие дефекта как способ описания взаимодействия полей КЭД с материальными объектами, мы построили и исследовали ряд модифицированных моделей КЭД для двумерных материалов простой геометрической формы (плоскость, сфера, цилиндр). В них проведены расчеты сил Казимира, характеристик процессов рассеяния и свойств связанных состояний, изучены некоторые магнито-электрические эффекты.

## Список литературы

- [1] K.Symanzik, *Schrödinger representation and Casimir effect in renormalizable quantum field theory*. Nucl. Phys. B, **190**, 1-44 (1981)



# SUPERCONDUCTIVITY OF STRONGLY CORRELATED ELECTRONS ON THE HONEYCOMB LATTICE

N.M. Plakida<sup>1</sup>, A.A. Vladimirov<sup>1</sup>, D. Ihle<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Joint institute for Nuclear Research, Dubna, Russia,*

<sup>2</sup>*Leipzig University, Germany*

*plakida@theor.jinr.ru*

Microscopic theory of superconductivity of strongly correlated electrons on the two-dimensional honeycomb lattice with two sublattices  $A, B$  is presented [1]. We study the t-J model in terms of the projected (Hubbard) operators, e.g.,  $\tilde{a}_{i\sigma}^+ = a_{i\sigma}^+(1 - n_{i-\sigma})$  is the creation electron operator on the lattice site  $i = (\mathbf{r}_i, A, B)$  with spin  $\sigma$  and  $n_{i\sigma} = \tilde{a}_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma}$  is the number operator. The commutation relations for the operators,  $\tilde{a}_{i\sigma} \tilde{a}_{j\sigma}^+ + \tilde{a}_{j\sigma}^+ \tilde{a}_{i\sigma} = \delta_{ij}(1 - n_{i\sigma}/2 + \sigma S_i^z)$ , reveals the kinematical interaction of electrons with number and spin operators. Using the Green function method in terms of the Hubbard operators a self-consistent system of equations is obtained. In the normal state the spectrum of electrons is similar to that one of the graphene:

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = -\tilde{\mu} \pm \tilde{t}|\gamma(\mathbf{k})|, \quad \gamma(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} \exp(i\mathbf{k}\delta_{\alpha}),$$

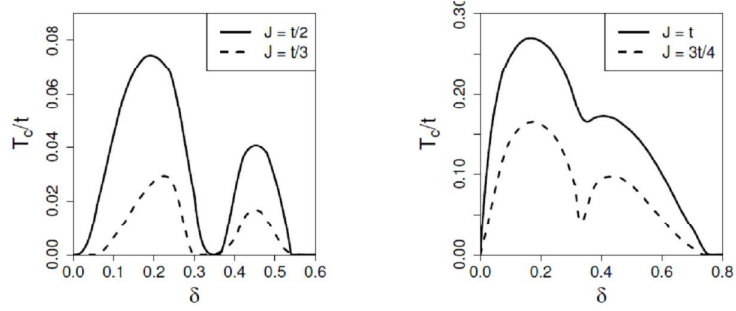
$$\delta_1 = (a/2)(\sqrt{3}, -1), \quad \delta_2 = -(a/2)(\sqrt{3}, 1), \quad \delta_3 = a(0, 1).$$

The hopping parameter  $t$  is renormalized due to short-range AFM correlations that results of the Fermi surface reconstruction with doping. Solution of the gap equation in the superconducting state shows the superconducting pairing of s- and d-wave symmetry:

$$\Delta_s(\mathbf{k}) = \Delta_s \sum_{\alpha} \exp(i\mathbf{k}\delta_{\alpha}) = \Delta_s \gamma(\mathbf{k}), \quad \Delta_d(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha} \Delta_{1\sigma} e^{i(2\pi/3)\alpha} \exp(i\mathbf{k}\delta_{\alpha})$$

$$\Delta_{s(d)}(\mathbf{k}) = \frac{J}{N} \sum_{q, \alpha} e^{i(k-q)\delta_{\alpha}} \Delta_{s(d)}(\mathbf{q}) \left[ \frac{1}{2\varepsilon_+(\mathbf{q})} \tanh \frac{\varepsilon_+(\mathbf{q})}{2T_c} + \frac{1}{2\varepsilon_-(\mathbf{q})} \tanh \frac{\varepsilon_-(\mathbf{q})}{2T_c} \right]$$

The s-pairing is prohibited due to the constrain of “no double-occupancy”:  
 $\langle \tilde{a}_{i\sigma}^+ \tilde{a}_{i-\sigma}^+ \rangle = 0$ . Figures 1 and 2 show  $T_c$  dependence on the hole concentration and  $J$  for the d-wave.



At half filling,  $\delta = 1/3$ , the chemical potential is zero at the Dirac points and  $T_c$  is zero for small values of  $J$ , while for  $J > 0.75t$  a gapless superconductivity with finite  $T_c$  emerges. For  $\delta < 1/3$  a coexistence of superconductivity and AFM order is possible.

## Список литературы

- [1] A. A. Vladimirov, D. Ihle, N. M. Plakida, Eur. Phys. J. B **91**, 195 (2018)

## КОЛЛАПС, НУКЛЕАЦИЯ И ВРЕМЕНА ЖИЗНИ СКЕРМИОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СИНТЕТИЧЕСКИХ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКАХ

**М. Н. Поткина<sup>1</sup>, И. С. Лобанов<sup>1</sup>, В. М. Уздин<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

*potkina.maria@yandex.ru*

Разработка беговой магнитной памяти на основе топологических хиральных структур делает актуальным анализ устойчивости таких состояний [1]. В антиферромагнетиках (АФ) и ферримагнитных материалах, в которых магнитостатическое дипольное взаимодействие подавлено, удастся получить отдельные скирмионы размером порядка нанометра, стабильные при комнатной температуре [2]. Однако детектирование скирмионов в АФ затруднено. Эта проблема может быть решена, если использовать синтетические АФ, в которых магнитные слои разделены немагнитной прослойкой так, чтобы межслойное взаимодействие было АФ [3, 4]. В рамках теории переходного состояния построены пути с минимальным перепадом энергии между состоянием с парой скирмионов и однородным состоянием в синтетических АФ. Найдены активационные барьеры для коллапса и нуклеации, получены времена жизни состояний и частоты нуклеации при произвольных температурах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00059, <https://rscf.ru/project/22-72-00059/>

### **References**

- [1] И. С. Лобанов, М. Н. Поткина, В. М. Уздин, *Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур*, (Миниобзор). Письма в ЖЭТФ, **113**, 833-847 (2021).
- [2] M. N. Potkina, I. S. Lobanov, H. Jónsson, V. M. Uzdin, *Skyrmions in antiferromagnets: Thermal stability and the effect of external field and impurities*. Journal of Applied Physics, **127**, 213906 (2020).
- [3] W. Legrand, D. Maccariello, F. Ajejas, S. Collin, A. Vecchiola, K. Bouzehouane, N. Reyren, V. Cros, A. Fert, *Room-temperature stabilization of antiferromagnetic skyrmions in synthetic antiferromagnets*. Nature Materials, **19**, 34–42 (2020).

## КОНКУРЕНЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНЫХ СОСТОЯНИЙ В ФЕРМИОННЫХ СИСТЕМАХ

А.В. Рожков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ИТПЭ, Москва, Российская федерация

arozhkov@gmail.com

Хорошо известно, что многофермионные системы могут демонстрировать пространственно неоднородные состояния. Хотя неоднородность может возникнуть под влиянием внешнего беспорядка, зачастую однородные состояния теряют устойчивость спонтанно, под действием исключительно внутренних факторов. Спонтанное образование неоднородностей наблюдается во многих случаях, от фермионных атомов в ловушках до квазиодномерных сверхпроводников. Именно такая ситуация и будет обсуждаться в докладе.

Теоретическое описание неоднородной фазы, замещающей нестабильную однородную фазу, принципиально проблематично. Главным образом это связано с тем, что, как правило, существует несколько типов неоднородных состояний («страйпы», слоистые и колумнарные структуры, и т.д.), конкурирующих друг с другом за возможность стать стабильным основным состоянием. Численные и аналитические расчеты убедительно демонстрируют, что в простейших многофермионных моделях, допускающих неустойчивость однородного состояния, конкурирующие неоднородные фазы имеют чрезвычайно близкие (свободные) энергии. В частности, для трехмерной слабо легированной модели Хаббарда в режиме слабого взаимодействия разница между соответствующими энергиями составляет несколько процентов [1]. Похожие результаты получены и для других режимов.

В ситуации, когда нетождественные состояния имеют столь близкие энергии, исход их конкуренции будет зависеть от множества факторов (беспорядок, дальнodelствующее кулоновское взаимодействие, жесткость кристаллической решетки), которые простейшие модели не в состоянии описать. Для понимания свойств системы в таких режимах роль экспериментальных данных выходит на первый план.

### **References**

- [1] S.V. Kokanova, P.A. Maksimov, A.V. Rozhkov, and A. O. Sboychakov, *Competition of spatially inhomogeneous phases in systems with nesting-driven spin-density wave state*. Phys. Rev. B, **104**, 075110 (2021)

## СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРОЕНИЯ КЛЕТОЧНЫХ МОНОСЛОЕВ С РАЗНОЙ СКОРОСТЬЮ ДЕЛЕНИЯ

Д.С. Рошаль<sup>1</sup>, К.К. Федоренко<sup>1</sup>, М. Мартин<sup>2</sup>, С. Багдигян<sup>2</sup>, С.Б. Рошаль<sup>1</sup>

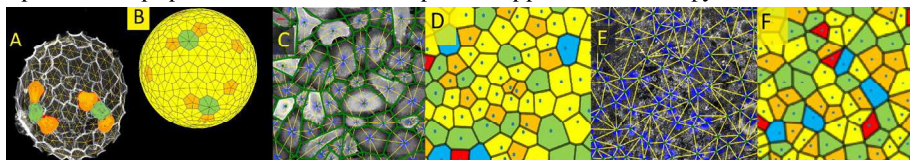
<sup>1</sup> Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону, Россия

<sup>2</sup> Университет Монпелье, Монпелье, Франция

rochal.d@yandex.ru

Развитие многих простых биологических систем определяется не только генетическим контролем, но и некоторыми математическими и физическими закономерностями. С помощью методов геометрического анализа микрофотографий (рис. 1 А,С,Е) и математического моделирования (В,Д,Ф) исследуются особенности топологии упаковки клеток в эпителиальных монослоях с разной скоростью роста: в гиперпролиферативных раковых клетках HeLa (Е,Ф), в пролиферативных клетках COS и HCEp1C (С,Д) и в непролиферативном эпителии, покрывающем яйца асцидий (А,В).

Показано, что чем медленнее растёт эпителий тем меньше в нем топологических дефектов (клеток с числом соседей  $\neq 6$ ). Однако даже в эпителии асцидий могут возникать протяженные топологические дефекты из-за кривизны и вариативности размеров клеток [1]. Порядок клеток в раковом эпителии наиболее близок к случайному [2]. С помощью моделирования показано, что в пролиферативном эпителии релаксация напряжений приводит к дополнительному упорядочиванию монослоя, по сравнению с гиперпролиферативным [2]. Особенности разных видов эпителия также были продемонстрированы с помощью парных корреляционных функций.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-00128, <https://rscf.ru/project/22-72-00128/>

### References

- [1] D.S. Roshal, et al. *Crystal-like order and defects in metazoan epithelia with spherical geometry*. Scientific Reports, **10**, 1-11 (2020).
- [2] D.S. Roshal, et al. *Random nature of epithelial cancer cell monolayers*. Journal of the Royal Society Interface, **19**, 20220026 (2022).

## САМООРГАНИЗАЦИЯ ДВУМЕРНЫХ КОЛЛОИДНЫХ СИСТЕМ – РОЛЬ ТРАНСЛЯЦИОННОГО И ОРИЕНТАЦИОННОГО ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

В.Н. Рыжов<sup>1</sup>, Е.А. Гайдук<sup>1</sup>, Ю.Д. Фомин<sup>1</sup>, Е.Н. Циок<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики высоких давлений РАН, г. Москва, Калужское шоссе, 14*

*ryzhov@hppi.troitsk.ru*

В докладе обсуждаются основные современные сценарии самоорганизации – плавления, кристаллизации, перехода в стекло - двумерных систем в зависимости от вида потенциала. В настоящее время можно говорить о трех возможных сценариях двумерного плавления. Прежде всего, это теория Березинского-Костерлица-Таулеса-Хальперина-Нельсона-Янга (BKTHNY) [1], в которой был предложен нестандартный сценарий плавления двумерных кристаллов посредством двух непрерывных переходов с промежуточной гексатической фазой. При этом фазовый переход первого рода также может реализоваться [1]. Сравнительно недавно был предложен еще один сценарий плавления, в рамках которого плавление также может происходить посредством двух переходов, однако при этом переход твердое тело - гексатическая фаза происходит посредством непрерывного перехода типа БКТ, а переход гексатическая фаза - изотропная жидкость - посредством перехода первого рода [1]. Физический механизм рассматриваемых переходов определяется поведением топологических дефектов – дислокаций и дисклинаций – связанных с трансляционным и ориентационным параметрами порядка. В докладе обсуждаются методы компьютерного моделирования, применяемые для анализа возможных сценариев плавления в применении, в частности, к потенциалу Герца, служащему для качественного описания коллоидных систем [2,3].

Работа поддержана грантом РНФ 19-12-00092  
<https://rscf.ru/project/19-12-00092/>.

### **References**

1. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *Переход Березинского—Костерлица—Таулеса и двумерное плавление*. УФН, **187**, 921 (2017)
2. В. Н. Рыжов, Е. Е. Тареева, Ю. Д. Фомин, Е. Н. Циок, *Сложные фазовые диаграммы систем с изотропными потенциалами: результаты компьютерного моделирования*. УФН, **190**, 449 (2020)
3. Eu. A. Gaiduk, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, and V. N. Ryzhov, *Anomalous behavior of a two-dimensional Hertzian disk system*. Phys. Rev. E, **106**, 024602 (2022)

# **ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОДЕЛИ ДИНАМИКИ МНЕНИЙ ДЛЯ МУЛЬТИАГЕНТНОЙ СИСТЕМЫ СО СТОХАСТИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИЕЙ СВЯЗЕЙ**

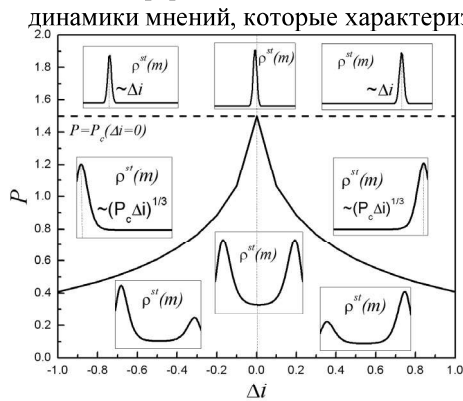
**Н.Е.Савицкая<sup>1</sup>, Т.А.Федорова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> НИЦ ``Курчатовский институт'', Петербургский институт ядерной  
физики им. Б.П.Константинова, Гатчина, Россия

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный морской технический университет,  
Санкт-Петербург, Россия

*Savitskaya\_ne@pnpi.nrcki.ru*

В докладе представлена модель динамики мнений в мультиагентной системе, описывающая, в отличие от ранее предложенных моделей [1], не только сам процесс, но и его причину. В рамках предлагаемой модели агенты меняют мнения в результате лавинообразных изменений информационного давления в системе. При этом агенты, которые в данный момент времени связаны со своими соседями, могут принимать их мнение, участвуя в информационной лавине. Агенты, не связанные в данный момент со своими соседями, но испытывающие избыточное информационное давление, меняют свое мнение на знак поступающей в систему внешней информации [2]. Аналитически и численно мы показываем, что в зависимости от отношения вероятностей этих двух конкурирующих процессов  $P$  и преобладающего знака внешней информации  $\Delta i$ , в системе возможна реализация нескольких режимов динамики мнений, которые характеризуются различным поведением функции



плотности вероятности для  
среднего по системе мнения  
 $\rho(i)$ . Фазовая диаграмма

представлена на рисунке. Мы исследовали происходящие в системе фазовые переходы и, в частности, показали, что при  $\Delta i = 0$  происходит классический фазовый переход второго рода, а критические показатели системы равны, соответственно,  
 $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$ .

## **Литература**

- [1] A.F.Perlata, R.Toral, *Binary-state dynamics on complex networks*, Phys. Rev. Research 2, 043370 (2020)
- [2] Н.Е.Савицкая, Т.А.Федорова, *Динамические свойства модели формирования мнения в мультиагентной системе с изменяющейся структурой связей в условиях информационного давления*, ЖЭТФ, **160**(10), 714 (2021)

## НОВЫЙ КАЛИБРОВОЧНО-ИНВАРИАНТНЫЙ МЕТОД В ТЕОРИИ ЭФФЕКТА КАЗИМИРА

В.Н. Марачевский<sup>1</sup>, А.А. Сидельников<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Россия,  
Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

<sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Россия,  
Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9

[v.marachevsky@spbu.ru](mailto:v.marachevsky@spbu.ru), [maraval@mail.ru](mailto:maraval@mail.ru), [st074065@student.spbu.ru](mailto:st074065@student.spbu.ru)

В работе [1] разработан новый калибровочно-инвариантный метод для вывода сил Казимира и потенциала Казимира-Полдера. Получена формула для потенциала Казимира-Полдера анизотропного атома, находящегося между двумя диэлектрическими полупространствами. При выводе формулы Лифшица [2] скорректированы формулы для соответствующих данной задаче функций Грина из книги [3], что необходимо для калибровочной инвариантности теории и получения корректного выражения для потенциала Казимира-Полдера атома, находящегося между двумя диэлектрическими полупространствами. В работе показано, что формулы Лифшица и Казимира-Полдера применимы к 2+1-мерному проводящему граничному слою и импедансным граничным условиям при использовании коэффициентов отражения, соответствующих граничным условиям.

Участие авторов в работе международной конференции "Современные проблемы теории конденсированных сред (ТКС 2022)" поддержано проектом РНФ № 22-13-00151.

### **References**

- [1] V.N. Marachevsky and A.A. Sidelnikov, *Green Functions Scattering in the Casimir Effect*. Universe, **7**, 195 (2021)
- [2] E.M. Lifshitz, *The Theory of Molecular Attractive Forces between Solids*. JETP, **29**, 94-110 (1955)
- [3] E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics, Part II*. Pergamon: Oxford, UK (1980)



**FOLDY-WOUTHUYSEN TRANSFORMATION AND MULTIWAVE STATES  
OF A GRAPHENE ELECTRON IN EXTERNAL FIELDS AND FREE  
(2+1)-SPACE**

**A.J. Silenko**

*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

*alsilenko@mail.ru*

The contemporary method of the Foldy-Wouthuysen (FW) transformation is used for a planar graphene electron in electric and magnetic fields and the free (2+1)-space. The FW Hamiltonian in uniform and nonuniform magnetic fields is exact. The exact energy spectrum agreeing with experimental data and exact FW wave functions are obtained. These wave functions describe multiwave states, namely, Laguerre-Gauss and Hermite-Gauss beams. We prove that Hermite-Gauss beams of graphene electrons can exist even in the free space. Amazingly, electrons in such multiwave states acquire a nonzero effective masses depending on quantum numbers and move with group velocities which are less than the carrier velocity. We show that multiwave states of graphene electrons do not spread in the presence of an arbitrary static electric field.

# INTERACTION OF DOMAIN WALLS AND VORTICES IN THE TWO-DIMENSIONAL O(2) AND O(3) PRINCIPAL CHIRAL MODELS

A.O. Sorokin<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup> *Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P.Konstantinov  
of NRC «Kurchatov Institute», Gatchina, Russia*

<sup>2</sup> *Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia*

*aosorokin@gmail.com*

Using Monte Carlo simulations, we consider two models that combine both discrete and continuous degeneracies, and their spectrum contains two types of topological defects. These models are the Ising model interacting with the O(2) or O(3)×O(2) sigma models. In the first case, the model reduces to the Ising-XY model [1], where, depending on the exchange constants  $J_{XY}$ ,  $J_{Is}$  and  $J_{Int}$ , either two transitions occur sequentially or they unit into a single first-order transition. For  $J_{XY} \neq J_{Int}$ , the presence of two order parameters does not affect the critical behavior in both sectors of the model, including multicritical points. The case  $J_{XY} \simeq J_{Int}$  is more interesting because a domain wall becomes opaque for continuous parameter correlations, and its corners and kinks bring additional vorticity into the system. As a result, the XY transition occurs at a temperature below the Ising one, and the vortex density becomes larger than in the usual O(2) model. At first glance, dissociated pairs on a wall should also affect the critical properties walls, for example, by increasing their Hausdorff dimension; however, our studies have shown that the effective interaction of walls and vortices (the Pearson correlation coefficient) tends to zero in the vicinity of the Ising transition and in the thermodynamic limit, so the universal behavior is observed. A similar situation occurs in the O(3)×O(2) model, where the interaction of  $Z_2$  vortices and walls becomes trivial in the critical region, although such vortices can affect the critical behavior [2].

## **References**

- [1] S.E. Korshunov, *Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy*. Phys. Usp. **49**, 225 (2006).
- [2] A.O. Sorokin, *First order transition induced by topological defects in the O(3) principal chiral model*. Phys. Rev. B. **95**, 094408 (2017).

## THEORETICAL INVESTIGATION OF THE OXIDIZED BORON NITRIDE STABILITY

L.Yu. Sorokina<sup>1</sup>, L.A. Varlamova<sup>1</sup>, P.B. Sorokin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *National University of Science and Technology MISiS, Moscow, 119049, Russian Federation*

[l.sorokina@misis.ru](mailto:l.sorokina@misis.ru)

There is still no complete understanding of exactly how the oxidation of boron nitride occurs. If in the case of graphene oxidation occurs mainly through the sorption of oxygen on the surface in one form or another, for boron nitride is more characterized by the incorporation of oxygen into the lattice in the position of nitrogen. However, there is evidence that when the adsorption of molecular oxygen on the surface of boron nitride on a substrate of Ni(111) at low temperatures oxygen does not dissociate, but binds in the form of peroxide or sorbed in the form of hydroxyl groups.

Therefore, in this work we considered various variants of h-BN modification by oxygen and evaluated their temperature dependence. We showed that in the presence of molecular hydrogen in the system, oxygen can be deposited as an OH group. At ~330 K temperature, oxygen will be embedded into the lattice as defect or healing of existing defects. The OH groups are thermodynamically stable up to 500 K and desorb from the surface with temperature increasing therefore further addition of oxygen requires energy costs.

In the absence of a hydrogen source, the most stable is structure with embedded oxygen atoms as defect or up to a temperature of ~ 240 K oxygen spontaneously deposited on the surface of boron nitride without dissociation, in the form of peroxide. At higher temperatures this process does not occur spontaneously, the system is thermodynamically unstable. The incorporation of oxygen into the lattice with replacement of the nitrogen atom occurs at  $T = 1050$  K with energy costs. However, in the initial presence of defects in the structure, it is the embedding of oxygen into the lattice and the "healing" of the defect that will be most stable in all range of temperatures.

This work was supported by the Russian Science Foundation (Agreement No. 21-79-10411).

## NEW SHORT-WAVELENGTH SPIN EXCITATIONS IN NON-COLLINEAR SPIN-1/2 ANTIFERROMAGNETS

**A. V. Syromyatnikov**<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*National Research Center "Kurchatov Institute" B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute, Gatchina 188300, Russia*

*E-mail: asyromyatnikov@yandex.ru*

We discuss spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on simple square lattice in magnetic field  $H$  using the recently proposed [1] bond-operator technique (BOT). It is well known that magnetically ordered phases of quantum magnets are well described at least qualitatively by the conventional spin-wave theory (SWT) that only introduces quantum corrections into the classical solution of the problem. We observe that quantum fluctuations change drastically dynamical properties of the considered model at  $H$  close to its saturation value: the dynamical structure factor shows anomalies corresponding to Green's function poles which have no counterparts in the SWT. That is, quantum fluctuations produce multiple short-wavelength magnon modes not changing qualitatively the long-wavelength spin dynamics. Our results are in agreement with previous quantum Monte-Carlo simulations and exact diagonalization of finite clusters. [2]

We discuss also spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice using BOT. We use the variant of BOT which takes into account all spin degrees of freedom in the magnetic unit cell containing three spins. Apart from conventional magnons known from the SWT, there are novel high-energy collective excitations in BOT which are built from high-energy excitations of the magnetic unit cell. We obtain also another novel high-energy quasiparticle which has no counterpart not only in the SWT but also in the harmonic approximation of BOT. All observed elementary excitations produce visible anomalies in dynamical spin correlators. We show that quantum fluctuations considerably change properties of conventional magnons predicted by the SWT. The effect of a small easy-plane anisotropy is discussed. The anomalous spin dynamics with multiple peaks in the dynamical structure factor is explained that was observed recently experimentally in  $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$  and which the SWT could not describe even qualitatively. [3]

Support by RSF grant № 22-22-00028 is acknowledged.

### **References**

- [1] A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B **98**, 184421 (2018).
- [2] A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B **102**, 014409 (2020).
- [3] A.V. Syromyatnikov, Phys. Rev. B **105**, 144414 (2022).

## АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ИНДУЦИРОВАННОГО ЗАРЯДА В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

**И.С. Терехов**

*Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН,  
630090, Новосибирск, Россия  
E-mail: i.s.terekhov@gmail.com*

В настоящей работе мы исследуем поведение плотности заряда  $\rho_{ind}(r)$ , индуцированного внешним полем, в двумерных дихалькогенидах переходных металлов. Мы вычисляем  $\rho_{ind}(r)$ , индуцированную локализованным потенциалом  $U(r)$  с характерным радиусом локализации  $R$ , на расстояниях  $r \gg R$ . Вычисления проводятся точно по внешнему потенциалу. Для этого мы находим удобное интегральное представление для функции Грина квазичастицы  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'|\epsilon)$  во внешнем поле, выражаем плотность индуцированного заряда через контурный интеграл по энергии  $\epsilon$  от следа функции Грина, вычисляем этот интеграл при  $r \gg R$ , и получаем, что асимптотика индуцированного заряда на больших расстояниях имеет следующий вид:

$$\rho_{ind}(r) = F(r)\psi_U(U_0, R, \lambda),$$

где функция  $F(r)$  не зависит от потенциала и имеет вид:

$$F(r) = e^{\frac{e^{-2r/\lambda}}{\sqrt{\lambda}r^{3/2}}},$$

$e$  – заряд квазичастицы, а функция  $\psi$  зависит от формы потенциала и его характеристик, таких как глубина  $U_0$ , радиус  $R$ , а также от комптоновской длины волны квазичастицы в материале  $\lambda$ . Для потенциальной ямы, имеющей вид  $U(r) = -U_0\theta(R-r)$ , мы нашли простое аналитическое выражение для функции  $\psi(U_0, R, \lambda)$ , и провели анализ ее поведения при различных значениях параметров  $U_0$ ,  $R$  и  $\lambda$ . Кроме того, мы исследовали поведение функции  $\psi(U_0, R, \lambda)$  вблизи критического значения глубины потенциала  $U_0 = U_c$ , при котором происходят процессы рождения пар электрон-дырка.

## MAGNON BAND STRUCTURE OF SKYRMION CRYSTALS AND STEREOGRAPHIC PROJECTION APPROACH

**V.E. Timofeev<sup>1,2,3</sup>, D.N. Aristov<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*NRC "Kurchatov Institute" PNPI, Gatchina, Russia*

<sup>2</sup>*Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia*

<sup>3</sup>*Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, Russia*

*timofeeviktor@gmail.com*

Magnetic skyrmions (MS) are topologically protected configurations of local magnetization, observed, e.g., in non-centrosymmetric magnets with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. It is well known that in thin films MS condense into skyrmion crystals (SkX) [1]. The twisted character of skyrmionic configurations significantly complicates an analysis of elementary excitations in such systems. We develop a novel approach that allows to study magnon dynamics in a presence of a topologically nontrivial background [2]. This approach is based on a combination of semiclassical methods and stereographic projection representation of the local magnetization.

We define the equilibrium configuration of SkX in terms of the function of complex variable. We show that the stereographic projection representation corresponds rather precisely to the stereographic function of SkX in the form of a simple sum of solitary skyrmions. Considering infinitesimal fluctuations of the stereographic function, we find normal modes of fluctuations in harmonic approximation. We calculate excitations' dispersion of SkX and show that the appearing bands can be classified in terms of deformation types of individual skyrmions: dilatation, elliptical deformations etc. The topological properties of magnon band structure, i.e. Berry curvature and Chern numbers are discussed.

### **References**

- [1] Naoto Nagaosa and Yoshinori Tokura, *Topological properties and dynamics of magnetic skyrmions*, Nature Nanotechnology, 8, 899-911 (2013)
- [2] V.E. Timofeev and D.N. Aristov, *Magnon band structure of skyrmion crystals and stereographic projection approach*. Physical Review B, **105**, 024422 (2022)

## CLASSICAL AND QUANTUM CHAOS IN NONLINEAR VECTOR MECHANICS

N. Kolganov<sup>1,2,3</sup> and D.A. Trunin<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Moscow Institute of Physics and Technology, 141700, Institutskiy per., 9, Dolgoprudny, Russia*

<sup>2</sup>*Institute for Theoretical and Experimental Physics, 117218, B. Cheremushkinskaya, 25, Moscow, Russia*

<sup>3</sup>*Institute for Theoretical and Mathematical Physics, Moscow State University, 119991, Leninskie Gory, GSP-1, Moscow, Russia*  
E-mail: dmitriy.trunin@phystech.edu

A few years ago, out-of-time-ordered correlation functions were proposed as a new diagnostic of quantum chaos [1, 2, 3]. In chaotic systems, such correlation functions exponentially grow with time:  $\text{OTOC}(t) \sim e^{2\kappa_q t}$ , and the quantum Lyapunov exponent  $\kappa_q$  is believed to coincide with the classical exponent in the limit  $\hbar \rightarrow 0$ . Unfortunately, so far, such a correspondence has been shown only for a small number of quantum systems. Moreover, in most cases, the quantum Lyapunov exponent cannot be determined analytically [4].

We propose a convenient model, where the correspondence between the classical and quantum Lyapunov exponents can be checked directly: an  $O(N)$ -symmetric nonlinear vector mechanics. On one hand, we analytically calculate the quantum Lyapunov exponent using the augmented Schwinger-Keldysh technique in the large- $N$  limit. On the other hand, we numerically estimate the classical Lyapunov exponent in the high-temperature limit. In both cases, Lyapunov exponents approximately coincide and scale as  $\kappa \approx 1.3\sqrt[3]{\lambda T}/N$  with temperature  $T$ , number of degrees of freedom  $N$ , and coupling constant  $\lambda$ .

## Список литературы

- [1] S.H. Shenker, D. Stanford, *Black holes and the butterfly effect*. JHEP **2014**, 67 (2014).
- [2] J. Maldacena, S.H. Shenker, D. Stanford, *A bound on chaos*. JHEP **2016**, 106 (2016).
- [3] B. Swingle, *Unscrambling the physics of out-of-time-order correlators*. Nature Phys. **14**, 988 (2018).
- [4] T. Akutagawa, K. Hashimoto, T. Sasaki, R. Watanabe, *Out-of-time-order correlator in coupled harmonic oscillators*. JHEP **2020**, 13 (2020).



## A GENERAL VECTOR FIELD COUPLED TO A STRONGLY COMPRESSIBLE TURBULENT FLOW

**N.V. Antonov<sup>1,2</sup>, M.M. Tumakova<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>*St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia*

<sup>2</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia*

<sup>3</sup>*L.D. Landau Institute for Theoretical Physics, Chernogolovka, Russia*  
*m.m.kostenko@mail.ru*

We consider the model of a transverse vector (e.g. magnetic) field with the most general form of the nonlinearity, known as the  $\mathcal{A}$  model, passively advected by a strongly compressible turbulent flow, governed by the randomly stirred Navier-Stokes equation. The full stochastic problem is equivalent to a certain renormalizable field theoretic model with an infrared attractive fixed point. Thus, the scaling behaviour for the large-scale, long-distance behaviour is established. However, the question whether the parameter  $\mathcal{A}$  tends to a certain fixed-point value of the renormalization group equations or remains arbitrary, cannot be answered within the one-loop approximation of our study.

## ИЕРАРХИЯ МАСШТАБОВ В ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ХИРАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ И ПРОБЛЕМА УСТОЙЧИВОСТИ СОСТОЯНИЙ

В. М. Уздин, И. С. Лобанов

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: v\_uzdin@mail.ru

На основе теории переходного состояния для магнитных степеней свободы исследуется устойчивость топологических хиральных структур разного пространственного масштаба относительно тепловых флуктуаций и случайных внешних воздействий [1]. Разработаны алгоритмы поиска минимумов и седловых точек первого порядка на энергетических поверхностях размерности десятки миллионов. Развита методика расчета детерминантов гессиана энергии систем такой размерности, как в случае короткодействующего, например, обменного, так и дальнодействующего, диполь-дипольного взаимодействия. Для квазидвумерных скирмионных структур с топологическим зарядом показано, как времена жизни состояний зависят от пространственного масштаба системы. Исследованы механизмы формирования «топологической защиты» при уменьшении постоянной решетки и переходе от дискретного описания к непрерывному [2].

Для трехмерных топологических структур – скирмионных трубок, торонов, хиральных поплавок построена фазовая диаграмма, показывающая области существования локализованных топологических структур и границы их устойчивости. Предсказаны механизмы аннигиляции и взаимного превращения топологических магнитных структур друг в друга. Исследован вопрос об управлении магнитными состояниями в магнетиках и холестерических жидких кристаллах внешними полями и за счет близости интерфейсов или границ образца [3].

Исследовано взаимодействие локальных топологических структур в разных частях фазовой диаграммы и возможность построения из них кластеров, свпхрешеток и других упорядоченных структур.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00632, <https://rscf.ru/project/22-22-00632/>

### References

- [1] И.С. Лобанов, М.Н. Поткина, В.М.Уздин, *Устойчивость и времена жизни магнитных состояний нано- и микроструктур (Миниобзор)*. Письма в ЖЭТФ, **113** (12), 833 (2021)
- [2] I.S. Lobanov, V.M. Uzdin *The lifetime of micron scale topological chiral magnetic states with atomic resolution*. Comp. Phys. Comm., **269**, 108136 (2021)
- [3] I. M. Tambovtsev, A.O. Leonov, I.S. Lobanov, A.D. Kiselev, V.M. Uzdin, *Topological structures in chiral media: Effects of confined geometry*, Phys. Rev. E **105**, 034701 (2022)

## САМОСОГЛАСОВАННАЯ РЕЛАКСАЦИОННАЯ ТЕОРИЯ КОЛЛЕКТИВНОЙ ДИНАМИКИ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

А.В. Мокшин<sup>1</sup>, И.И. Файрушин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Казанский федеральный университет, Казань, Россия

*fairushin\_ilnaz@mail.ru, <https://kpfu.ru/>*

Однокомпонентная неидеальная плазма является наиболее подходящей многочастичной системой для развития микроскопической теории жидкостей. В основном это связано со специфическим потенциалом межчастичного взаимодействия, а также с достаточно большим массивом имеющихся экспериментальных данных и результатов молекулярно-динамических расчетов, которые могут быть использованы для проверки правильности теоретических выводов [1-3]. В этом докладе мы представим микроскопическую теорию коллективной динамики частиц (ионов) однокомпонентной плазмы, где только потенциалы взаимодействия и структурные характеристики используются в качестве входных параметров. Основные экспериментально измеряемые характеристики равновесной коллективной динамики ионов - спектры динамического структурного фактора, законы дисперсии, скорость звука и затухание звука - определяются в рамках теории без использования каких-либо подгоночных параметров. Это исследование представляет собой прямую реализацию ключевой идеи статистической механики: для теоретического описания коллективной динамики равновесных жидкостей достаточно знать потенциал взаимодействия частиц и характеристики структуры.

Авторы выражают признательность Фонду развития теоретической физики и математики “БАЗИС” (проект № 20-1-2-38-1).

### **References**

- [1] A.V. Mokshin, I.I. Fairushin, I.M. Tkachenko *Self-consistent relaxation theory of collective ion dynamics in Yukawa one-component plasmas under intermediate screening regimes*. Phys. Rev. E, **105**, 025204 (2022)
- [2] A.V. Mokshin and B.N. Galimzyanov *Self-consistent description of local density dynamics in simple liquids. The case of molten lithium*. J. Phys.: Condens. Matter, **30**, 085102 (2018)
- [3] Yu.V. Arkhipov et al. *Direct Determination of Dynamic Properties of Coulomb and Yukawa Classical One-Component Plasmas*. Phys. Rev. Lett., **119**, 045001 (2017)

## ТЕОРИЯ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ ДВУСЛОЙНОГО ГРАФЕНА И НАНОТРУБОК И МЕЖ-ТРУБОЧНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ

Д.В. Чалин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

*chalin.d.v@mail.ru*

В настоящей работе развивается общая теория электронной зонной структуры как соразмерных, так и несоразмерных двухслойных графеновых структур. Для моделирования зонной структуры двухслойного графена (ДСГ), в котором слои развернуты относительно друг друга на некоторый соразмерный угол, мы применяем классическую теорию сложения зон в комбинации с приближением сильно связанных электронов [1]. В рамках данного подхода строятся гамильтонианы с размерностью  $4T$ , где число  $T$  показывает во сколько раз элементарная ячейка соразмерного бислоя графена больше ячейки его монослоя. Предлагается и обсуждается метод выбора редуцированного базиса волновых функций для построения низкоразмерных эффективных гамильтонианов, корректно описывающих низкоэнергетический спектр соразмерного ДСГ. Как мы показываем, этот спектр является результатом взаимодействий между самыми низкоэнергетическими модами дисперсионных кривых, уложенных в новую в  $T$  раз уменьшенную первую зону Бриллюэна. Схожим образом строятся эффективные гамильтонианы для расчета низкоэнергетической зонной структуры несоразмерного ДСГ и двустенных углеродных нанотрубок (ДУНТ). Для проверки разработанной теории мы рассчитали энергии 105 оптических переходов в 29 ДУНТ и сравнили их с ранее опубликованными и новыми экспериментальными данными. Мы также применяем теорию для расчета энергий недавно открытых меж-трубочных оптических переходов [2] и обсуждаем геометрические условия, разрешающие такой тип переходов.

### **References**

- [1] D. V. Chalin, D. I. Levshov, A. E. Myasnikova, & S. B. Rochal, *Tight-binding approximation for bilayer graphene and nanotube structures: From commensurability to incommensurability between the layers*. Physical Review B, **105**(4), 045402 (2022).
- [2] D. V. Chalin, & S. B. Rochal, *Band structure and inter-tube optical transitions in double-walled carbon nanotubes*. Physical Review B, **102**(11), 115426 (2020).

## SP<sup>3</sup>-HYBRIDIZED FILMS BASED ON HEXAGONAL NITRIDE BILAYERS: DFT STUDIES OF STRUCTURES AND PROPERTIES

L. A. Chernozatonskii<sup>1,2</sup>, K. P. Katin<sup>2</sup>, A. I. Kochaev<sup>1,3</sup>, M. M. Maslov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosigin Str., Moscow, 119334, Russian Federation*

<sup>2</sup>*National Research Nuclear University "MEPhI", Kashirskoe Shosse 31, Moscow, 115409, Russian Federation*

<sup>3</sup>*Research and Education Center "Silicon and Carbon Nanotechnologies", Ulyanovsk State University, 42 Leo Tolstoy Str., Ulyanovsk, 432017, Russian Federation*

Diamanes – 2 D diamond-like films are being discovered only recently, therefore intensive studies to fully understand them are urgently required. Whenever a new material like diamane is discovered, enough fundamental and engineering research is needed. Early preliminary studies of such robust 2D dielectrics based on functionalized graphene layers raised high hopes about their appropriateness for quantum-electronic, quantum-computing, nano-sensors, next generation energy storage devices, etc. as discussed in the last reviews [1]. However, at present, not only graphene layers, but also layers of other crystals are being successfully studied. Among them, nitrides, which have a wide range of properties, are of great interest.

Here we report short review of 2D diamond-like materials and present the *ab initio* computation results of new class of sp<sup>3</sup>-hybridized films based on 2D hexagonal untwisted and twisted bilayers of (BN, AlN, GaN) nitrides - nitranes (diamane analogues): its atomic and electronic structures, infrared, Raman and optic absorption spectra, elastic and piezoelectric properties. We consider different variants choosing more energetically stable films. Between them there are semiconductors and dielectrics which broad diapason of optic gaps, which properties are differ from its 3D crystals. [2, 3].

The reported study was financially supported by Russian Science Foundation (project 22-22-01006).

### References

- [1] F. Lavini, M. Rejhon, R.M.; Riedo, E. Two-dimensional diamonds from sp<sup>2</sup>-to-sp<sup>3</sup> phase transitions. *Nature Reviews Materials* 2022 <https://doi.org/10.1038/s41578-022-00451-y>; K. S. Tiwari et al. *Progress in Diamanes and Diamanoids Nanosystems for Emerging Technologies Adv. Sci.* 2022, **9**, 2105770
- [3] L. A. Chernozatonskii, K. P. Katin, A. I. Kochaev, M. M. Maslov. Moiré and non-twisted sp<sup>3</sup>-hybridized structures based on hexagonal boron nitride bilayers: *ab initio* insight into infrared and Raman spectra, bands structures and mechanical properties [https://papers.ssrn.com/sol3/papers.cfm?abstract\\_id=4136970](https://papers.ssrn.com/sol3/papers.cfm?abstract_id=4136970)
- [4] L. A. Chernozatonskii, A. I. Kochaev, Nitranes - sp<sup>3</sup>-bonded nitride films

*transformed from twisted two-dimensional AlN, GaN and BN layers by  
hydrogenation or fluorination: atomic and electronic structures (2022, in press)*

# TAN'S ADIABATIC SWEEP THEOREM FROM THE VARIATIONAL THEOREM FOR THE SCATTERING LENGTH AND ITS GENERALIZATIONS

Alexander Yu. Cherny<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russian Federation*  
*E-mail: cherny@theor.jinr.ru*

It is shown that variation of the one-particle dispersion in a universal many-body system of arbitrary dimension enables us to obtain Tan's adiabatic sweep theorem and its generalizations. The derivation is based on the Hellmann-Feynman theorem and the variational theorem for the scattering length, suggested many years ago. The scheme is physically transparent and based on simple quantum mechanics. As an example, the universal effects in the system of spinless bosons are considered. In particular, the pair distribution function is calculated at short distances by means of the variation of the potential.

## References

- [1] Alexander Yu. Cherny, *Tan's adiabatic sweep theorem from the variational theorem for the scattering length*, Phys. Rev. A, **104**, 043304 (2021).
- [2] Alexander Yu. Cherny, *The variational theorem for the scattering length in low dimensions and its applications to universal systems*, J. Phys. A: Math. Theor., **55**, 155004 (2022).

## АДСОРБЦИЯ КИСЛОРОДА НА ЛЕГИРОВАННОЙ ПОВЕРХНОСТИ $\text{Ti}_5\text{Si}_3(0001)$

Л.С. Чумакова<sup>1</sup>, А.В. Бакулин<sup>1</sup>, С.Е. Кулькова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

*chumakova.lora@mail.ru*

Силициды переходных металлов используются в качестве омических контактов вследствие низкого электрического сопротивления и термической совместимости с кремнием. Они также могут применяться в качестве конструкционных материалов при  $T > 1100^\circ\text{C}$ . Легирование и способ обработки могут существенно влиять на свойства данных материалов. Недавно было предложено новое диффузионное покрытие сплава  $\gamma\text{-TiAl}$  [1]. Было показано, что формирование  $\text{Ti}_5\text{Si}_3$  внутри покрытия может ограничивать взаимную диффузию между этим покрытием и подложкой сплава, что приводит к повышению долгосрочной коррозионной стойкости покрытия. Целью настоящей работы является изучение адсорбции кислорода на поверхности силицида титана  $\text{Ti}_5\text{Si}_3$  и влияния примесей на этот процесс.

Адсорбция кислорода изучалась методом проекционных присоединенных волн (PAW) [2] с обобщённым градиентным приближением [3] для обменно-корреляционного функционала. Использовалась модель несимметричной пленки. Расчеты показали, что энергия адсорбции кислорода незначительно повышается для металлов начала  $d$ -периодов и понижается для элементов, стоящих в периодической таблице правее V, Nb и Ta. Первое обусловлено размерным эффектом примеси, поскольку атом кислорода смещается к двум оставшимся атомам титана, что усиливает O–Ti взаимодействие. Понижение энергии адсорбции усиливается с увеличением числа валентных электронов примесного атома. Такое поведение обусловлено понижением ионного вклада в механизм химической связи кислорода с поверхностью.

### References

- [1] J. Huang, F. Zhao, X. Cui, J. Wang and T. Xiong *Long-term oxidation behavior of silicon-aluminizing coating with an in-situ formed  $\text{Ti}_5\text{Si}_3$  diffusion barrier on  $\gamma\text{-TiAl}$  alloy*. Applied Surface Science, **582**, P. 152444 (2022)
- [2] G. Kresse, D. Joubert *From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method*. Physical Review B, **59**, P. 1758–1775 (1999)
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof *Generalized gradient approximation made simple*. Physical Review Letters, **77**, P. 3865–3868 (1996)



## АНОМАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ДЖОЗЕФСОНА

Ю.М. Шукринов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ОИЯИ, Дубна, Россия

<sup>2</sup> Университет Дубна, Дубна, Россия

*shukrinv@theor.jinr.ru*

Аномальный эффект Джозефсона заключается в возникновении в гибридной структуре фазового сдвига  $\varphi_0$ , приводящего к конечному сверхпроводящему току при нулевой разности фаз. Представлен анализ основных теоретических и экспериментальных работ, посвященных аномальному эффекту Джозефсона, приведены примеры его проявления в различных системах. Обсуждаются новые эффективные методы переворота магнитного момента в  $\varphi_0$  переходе, а также исследования квантовых свойств джозефсоновских наноструктур с магнитными и топологически нетривиальными барьерами для создания новых устройств сверхпроводниковой спинтроники. Приводятся результаты исследования магнитной динамики вдоль вольт-амперной характеристики  $\varphi_0$  перехода и анализа спиновой динамики в таких переходах. Рассмотрен вопрос о возможности контроля магнитной прецессии возникновением высших гармоник в соотношении ток-фаза, а также dc компоненты тока, которые значительно возрастают вблизи ферро-магнитного резонанса. Интересные явления в  $\varphi_0$  переходе возникают при воздействии внешнего электромагнитного излучения. Обсуждаются перспективы исследований и нерешенные задачи.

### References

Шукринов Ю. М. Аномальный эффект Джозефсона УФН, 192, 345–385 (2022)

## РАСКЛИНИВАЮЩЕЕ ДАВЛЕНИЕ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ КАПЕЛЕК И ПУЗЫРЬКОВ

А.К. Щёкин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург,  
Россия

akshch@list.ru

Во многих явлениях, связанных с межфазными границами, большую роль играет образование на этих границах тонких жидких или газовых прослоек между фазами. Сильная неоднородность внутри таких прослоек из-за перекрытия поверхностных слоев на разных сторонах прослоек приводит к возникновению расклинивающего давления [1,2]. В случае устойчивой прослойки со сферической поверхностью расклинивающее давление действует в противовес капиллярному давлению [2]. В данном сообщении будет представлен обзор результатов исследования за последние 25 лет роли расклинивающего давления при нуклеации термодинамически устойчивых капелек в паре на смачиваемых и пузырьков в жидкости на несмачиваемых твёрдых сферических ядрах. Будет рассмотрен феноменологический подход [3] в случае нуклеации капель на основе использования изотерм расклинивающего давления для плоских жидких пленок на смачиваемых подложках. Этот подход имеет свои пределы при уменьшении радиуса твёрдых ядер. Будут рассмотрены также молекулярные подходы [4,5] на основе различных вариантов метода функционала молекулярной плотности при расчетах термодинамических и структурных характеристик устойчивых капелек и пузырьков вокруг наноразмерных твёрдых ядер.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-13-00151, <https://rscf.ru/project/22-13-00151/>

### **References**

- [1] Б.В. Дерягин, Н.В. Чураев, В.М. Муллер *Поверхностные силы*. М.: Наука (1985).
- [2] F.M. Kuni, A.K. Shchekin, A.I. Rusanov and B. Widom *Role of surface forces in heterogeneous nucleation on wettable nuclei*. Adv. Colloid Interface Sci., **65**, 71-124 (1996)
- [3] Ф.М. Куни, А.К. Щёкин, А.П. Гринин *Теория гетерогенной нуклеации в условиях постепенного создания метастабильного состояния пара*. УФН, **171**, 345-385 (2001).
- [4] A.K. Shchekin, T.S. Lebedeva, D. Suh *The overlapping surface layers and the disjoining pressure in a small droplet*. Coll. and Surf. A, **574**, 78–85 (2019).
- [5] A.K. Shchekin, L.A. Gosteva, D.V. Tatyanyanenko *Disjoining pressure in vapor layers near planar and spherical lyophobic surfaces*. Colloids and Surfaces A, 615, 126277 (2021).

**STRUCTURAL INHERITANCE AND MACHINE LEARNING FOR  
MATERIALS DESIGN:  
FROM STUDY OF LIQUID TO PREDICTION CRYSTALS**

**\*Nikolay Chtchelkatchev<sup>1\*</sup>, Roman Ryltsev<sup>2,1</sup>**

<sup>1</sup> *Vereshchagin Institute for High Pressure Physics, RAS, 108840 Moscow, Russia*

<sup>2</sup> *Institute of Metallurgy, Ural Branch RAS, 620016 Ekaterinburg, Russia*

*\*chtchelkatchev@hppi.troitsk.ru*

The use of machine learning is a new paradigm in modern computational materials science [1-2]. One of the most promising and widely accepted techniques is using ab initio reference data on energies, forces, and stress tensors to develop machine learning interatomic potentials (MLIPs) with a flexible functional form which can effectively fit the potential energy surface of the particle system. This approach allows solving the principal problems of ab initio simulations: the effects of “small size” and “short time”, associated with difficulties in simulating sufficiently large supercells at long enough computational times. MLIPs can provide nearly ab initio accuracy with orders of magnitude less computational cost for systems composed of up to millions of particles.

One of the most challenging applications of MLIPs is design of new functional materials on top of classical molecular dynamics simulations. It requires developing accurate MLIPs, universal for ordered (crystal) and disordered systems (melts, supercooled liquids, glasses) in wide temperature and concentration ranges. This is a difficult task for materials design when possible ordered structures are not known.

We have found that MLIPs for multicomponent metallic alloys trained only on disordered configurations can accurately describe crystal structures even at low temperatures. Training MLIP on liquid configurations is straightforward: using certain algorithm we generate disordered configurations and find energy, interatomic forces and virials using DFT. Disordered systems require rather large supercells (we use 512 particle sells) that include a number of possible local structural configurations. Sampling enough the configurational space one can build representative training dataset.

We address MLIPs for multicomponent metallic melts taking the ternary Al-Cu-Ni ones as a convenient example [3]. It is shown that MLIP trained on liquid configurations demonstrates good compositional transferability, which extends far beyond compositional fluctuations in the training configurations. Using so trained MLIP we can describe not only liquid, but find with ab initio accuracy all stable and low-lying metastable crystal configurations of AlCuNi using a laptop and USPEX genetic algorithm. The results obtained open up prospects for design multicomponent metallic alloys with MLIPs.

Support of Russian Science Foundation (#18-12-00438) is acknowledged.

**References:**

- [1] J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146401 (2007).
- [2] L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, et al, Phys. Rev. Mat. 3, 023804 (2019).
- [3] R.E. Ryltsev and N.M. Chtchelkatchev, J. Mol. Liq. 349, 118181 (2022).

## REGULATING SPIN DYNAMICS OF MAGNETIC NANOMATERIALS

**V.I. Yukalov<sup>1,2</sup> and E.P. Yukalova<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup>*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 141980, Russia*

<sup>2</sup>*Universidade de São Paulo, São Carlos 13560-970, Brazil*

*yukalov@theor.jinr.ru*

Magnetic nanomaterials are considered consisting of nanomolecules, nano-clusters, trapped atoms, or graphene flakes. The general case is treated taking account of dipolar and spinor forces, magnetic anisotropy, linear Zeeman term and the terms corresponding to static-current and alternating-current quadratic Zeeman effect. Spin representation of the Hamiltonian is derived. The methods of regulating fast spin reversal are suggested. Spin dynamics is treated in quasiclassical approximation, using scale separation approach, as well as by numerical computation. The possibility of fast spin reversal at the required moment of time is demonstrated. The regulated spin reversal can be used in spintronics for the operation of memory devices.

**THE COMPUTER MODELLING OF SUPERCONDUCTING TRANSITION  
TEMPERATURE FOR YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-d</sub> USING THE TOPOLOGICAL  
ELECTRON MOTION EFFECTS**

**E.I. Yuryeva<sup>1,2</sup>**

*<sup>1</sup>Ural State Agrarian University, Ekaterinburg, Russia*

*<sup>2</sup>Polzunov Ural State College, Ekaterinburg, Russia*

*Yuryeva55@mail.ru*

Within the framework of molecular-kinetic theory of rarefied gas and according to suggested in this work the extension of Drude theory the motion of non interacting free electron within solid state at not zero temperature is considered. Suggested in the present work the extension of Drude theory is concluded in detailization of mechanism of inelastic interaction of freely moving conduction electron with ionic core. With using the introduced by author relaxational model the evaluation of possible temperature superconducting transition values was carried out for the yttrium barium ceramics structure.

## QUANTUM-CHEMICAL CLUSTER CALCULATION IN MODEL OF QUANTUM MAGNETISM WITH STRONG SPIN-ORBIT INTERACTION

**V.Yu. Yushankhai<sup>1</sup>, L.A. Siurakshina<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research,  
141980 Dubna, Moscow Region, Russia*

<sup>2</sup>*Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, Joint Institute for  
Nuclear Research, 141980 Dubna, Moscow Region, Russia*

*yushankh@theor.jinr.ru*

Most of the magnetic materials are known as systems with strong electron correlations whose magnetic properties cannot be described with desired accuracy if commonly used methods of the Density Functional Theory (DFT) are applied. Our approach takes advantages of computational quantum chemistry methods that start with the all-electron exact electronic Hamiltonian and allow us to treat rigorously effects of electron correlations and calculate exchange coupling between magnetic moments in complex compounds. Magnetic atoms in these compounds are those with open electron shells, which are presented either by  $nd$  shells ( $n = 3, 4, 5$ ) of transition-metal elements, or  $4f$  and  $5f$  shells of the rare-earth or actinide elements, respectively.

Magnetic properties result from a competition of two main factors. The first is determined by a subtle interplay of local electron interactions (intraatomic Coulomb repulsion  $\sim U$ , Hund's exchange  $\sim J_H$  and the possibly large spin-orbit coupling  $\sim \lambda$ ) together with internal crystal fields, and the second is the delocalization that is measured by the kinetic energy  $\sim W$  gained by an electron due to its spreading over lattice sites; the latter is mediated by intermediate nonmagnetic ligand atoms. As the ratio  $U/W$  increases, effects of delocalization are reduced and the electronic system undergoes the transition into Mott-insulating state.

The aim of our study is to employ the quantum chemistry tools to derive an effective spin Hamiltonian whose properties reproduce as accurately as possible the low-energy physics in the Mott-insulating regime. With this aim one has to cut out a finite lattice fragment large enough for describing the desired properties. Then for this finite cluster the many-electron wave functions of the lowest states and their mutual energetic ordering are calculated and their symmetries are determined. The next step is to develop and apply rigorous techniques of extraction from these data the required effective spin Hamiltonian together with estimation of spin-spin coupling parameters. In case of complex compounds under consideration this

coupling is dominated by the mechanism of superexchange between magnetic atoms coupled through intermediate nonmagnetic ligand atoms. Finally, one argues that the spin Hamiltonian extracted for a fragment of the system is transferable to study the full system.

The authors present a review of some of their principal results [1-4] obtained along this way by application of quantum-chemical cluster methods for estimating the following two kinds of quantitative characteristics. Firstly, these are the above-mentioned local interactions responsible for a formation of the effective magnetic units at lattice sites with ligand crystalline environment of different spatial symmetry. Here, the particular attention is paid to the analysis of strong intra-atomic spin-orbit coupling contributing to the formation of a magnetic moment. Secondly, as the most typical example of calculating the superexchange parameters, we have performed cluster calculations for a wide family of iridium oxides with the effective spin Hamiltonian of general form including both the isotropic and strongly anisotropic couplings of neighboring spins. In general, the anisotropic coupling is bond dependent and may even dominates over the isotropic one. Thus, a quantitative justification is given for the application of various non-standard models of quantum magnetism proposed earlier on the phenomenological ground. The results of analytical and numerical analysis of some of these models are also presented.

## **References**

- [1] V. Katukuri *et al.*, Phys. Rev. X, **4**, 021051 (2014).
- [2] S. Nishimoto *et al.*, Nature Comm., **7**, 10273 (2016).
- [3] L. Xu *et al.*, Phys. Rev. B, **99**, 115119 (2019).
- [4] M. Eldeeb *et al.*, Phys. Rev. Mat., **4**, 124001 (2020).