

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

**РІЗДВЯНІ ДИСКУСІЇ 2023,
ПРИСВЯЧЕНІ 70-РІЧЧЮ ФІЗИЧНОГО ФАКУЛЬТЕТУ**

ПРОГРАМА І ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

Львів, 27–29 грудня 2023 року

РІЗДВЯНІ ДИСКУСІЇ 2023

27 грудня 2023 року

12:00 Відкриття святкового семінару, присвяченого 70-річчю фізичного факультету

Головуючий: **Я. Чорнодольський**

12:15–12:45 *П. Якібчук, О. Попель*, Про історію фізичного факультету Львівського університету

12:45–13:00 *М. Зарічний*, Коротка історія математики в Університеті за останні 70 років

13:00–14:00 Привітання

28 грудня 2023 року

Головуючий: **В. Ткачук**

10:00–10:20 *Yu. Holovatch*, The fate of Ernst Ising and the fate of his model: a hundred years on

10:20–10:40 *М. Зарічний*, Invariant idempotent *-measures for iterated function systems

10:40–11:00 *О. Нрыгорчак*, Application of a quantum wave impedance approach for 1D infinite periodic media

11:00–11:20 *А. Дувіряк*, Обертова динаміка дипольних частинок в електростатичному полі з урахуванням реакції випромінювання

11:20–12:00 Кава

Головуючий: **Ю. Головач**

12:00–12:20 *В. Ігнатюк*, Модель Ізинга у статистиці Рені

12:20–12:40 *V. Pastukhov*, Phases of Bose–Fermi mixtures in $4 - \varepsilon$ dimension

12:40–13:00 *Р. Колесник*, Заплутаність спіну $s = 1$ з іншими спінами у графовому стані для різних початкових станів спінів

13:00–13:20 *В. Melekh*, Detailed photoionization modeling of the nebular environment in dwarf galaxies

13:20–15:00 Обід

Головуючий: **М. Самар**

15:00–15:20 *S. Mudry*, Structural features at formation of stretchable electronics systems on the base liquid In–Ga–Sn and magnetic nanoparticles

15:20–15:40 *В. Михайлюк*, Кристалографія протеїнів з використанням рентгенівських квантів низьких енергій

15:40–16:00 *I. Kindrat*, Local structure and spectroscopic properties of complex lead silicate glass doped with Cu

16:00–16:20 *М. Moroz*, Numerical ground state energy prediction via neural variational Monte Carlo with evolution strategies

16:20–16:40 *М. Teslyk*, Semiclassical limit of quantum logic: information loss

29 грудня 2023 року

Головуючий: **Б. Новосядлий**

10:00–10:20 *A. Швайка*, Квантові флуктуації та квантовий хаос локалізованих станів: позачасово впорядковані кореляційні функції для моделі Фалікова–Кімбала

10:20–10:40 *A. Trokhymchuk*, Unexpected local density bimodality in 2D hard disks under extreme confinement

10:40–11:00 *V. Shevchuk*, Ion migration pathways in crystals with scheelite-type structure

11:00–11:20 *M. Samar*, Harmonic oscillator with a delta-function potential at the origin in deformed space with minimal length

11:20–12:00 Кава

Головуючий: **А. Трохимчук**

12:00–12:20 *Б. Новосядлий*, Сигнал в лінії гідрогену 21 см з раннього Всесвіту: теоретичні передбачення і спостережні перспективи

12:20–12:40 *Н. Фтомин*, Високоточна поляриметрія кристалів Rb_2SO_4

12:40–13:00 *П. Щепанський*, Вплив домішки мангану на оптико-електронні характеристики кристала сульфату калію

13:00–13:20 *В. Padlyak*, Local structure and spectroscopy of the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Mn},\text{Er}$ glass

13:20–15:00 Обід

Головуючий: **Б. Падляк**

15:00–15:20 *Ю. Яремко*, Квантова теорема Ерншоу

15:20–15:40 *Р. Hryniv*, On rank-one perturbations of PT -symmetric Hamiltonians

15:40–16:00 *Т. Banakh*, Philosophical, theological and classical foundations of mathematics

16:00–16:20 *Kh. Gnatenko*, Partition problem and its solution with quantum programming

16:20–16:40 *В. Ткачук*, Заплутаність квантових станів релятивістських систем

16:45–... Закриття

THE FATE OF ERNST ISING AND THE FATE OF HIS MODEL: A HUNDRED YEARS ON

Yurij Holovatch

¹Institute for Condensed Matter Physics NASU, Lviv,

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

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

⁴Complexity Science Hub Vienna, Vienna, Austria

The talk is based on an ongoing project that aims to prepare a bilingual, commented edition of the doctoral thesis of Ernst Ising [1]. This project emerged through collaborations enabled by the Ising lectures [2], a workshop that started in Lviv in 1997 with ‘traditional’ statistical physics and has recently broadened its scope to encompass a more general context of complex systems [3]. Gradually the workshop gave rise to various research projects centered around the Ising model and its history [4, 5, 6], some collected historical documents and memoirs are displayed publicly with permission of Ernst Ising’s family at <http://www.icmp.lviv.ua/ising>.

The model suggested by Wilhelm Lenz for ferromagnetism in 1920 was formulated and solved in one dimension by his doctoral student Ernst Ising in 1924. That work of Lenz and Ising marked the start of a scientific direction that delivered extraordinary successes in explaining collective behaviour in a vast variety of systems, both within and beyond the natural sciences. Some of the milestones in this direction will be a subject of this talk.

Another goal of the talk is to present a personal story of Ernst Ising who had to struggle to survive during the years of the Nazi regime. The story of his fate stirs special feelings today, when its background is repeated by an (academic) community supporting a dictator, and supporting aggression — in this case Russian aggression in Ukraine.

[1] B. Berche, R. Folk, Yu. Holovatch, R. Kenna, *in preparation*

[2] *Ising lectures in Lviv (1997–2017)*, edited by M. Krasnytska, R. de Regt, P. Sarkanych. Lviv, ICMP, 2017, 218 p.

[3] Yu. Holovatch, R. Kenna, S. Thurner, *Eur. Journ. Phys.* **38**, 023002 (2017).

[4] T. Ising, R. Folk, R. Kenna, B. Berche, Yu. Holovatch, *Journ. Phys. Stud.* **21**, 4001 (2017).

[5] R. Folk, Yu. Holovatch, *Eur. J. Phys. H* **47**, 9 (2022).

[6] R. Folk, in: *Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory. Vol. 7*, Yu. Holovatch (editor) (World Scientific, Singapore, 2023), pp. 1–77.

INVARIANT IDEMPOTENT *-MEASURES FOR ITERATED FUNCTION SYSTEMS

*N. Mazurenko*¹, *Kh. Sukhorukova*², *M. Zarichnyi*²

Vasyl Stefanyk Precarpathian University, Ivano-Frankivsk

Ivan Franko National University of Lviv

A triangular norm (t-norm) is a continuous, associative, commutative and monotonic operation on the unit segment $[0,1]$ for which 1 is a unit. Every t-norm $*$ determines the notion of idempotent $*$ -measure, i.e., a functional on the spaces of continuous functions on a space that preserves constant, maxima, and is $*$ -homogeneous [1].

In [2] the invariant idempotent measures for iterated function systems are defined and the existence and uniqueness theorem for such measures is proved. The proof is based on functional representation of measures. In [3] the authors proved the existence and uniqueness of invariant idempotent measures by using Zaitov's metric [4] as well as modified Bazylevych–Repovš–Zarichnyi metric on the space of idempotent measures [5] and applying the Banach contraction principle.

In the talk we provide a simple proof of existence and uniqueness of invariant idempotent measures that works also for the $*$ -idempotent measures.

- [1] Kh. Sukhorukova, *Matem. Studii* **59**, 215 (2023).
- [2] N. Mazurenko, M. Zarichnyi, *Carpathian Math. Publ.* **10**, 172 (2018).
- [3] R. D. da Cunha, E. R. Oliveira, F. Strobil, *J. Fixed Point Theory Appl.* **25**, 8 (2023).
- [4] A. A. Zaitov, *Appl. Gen. Topol.* **21**, 35 (2020).
- [5] L. Bazylevych, D. Repovš, M. Zarichnyi, *Topology Appl.* **157**, 135 (2010).

APPLICATION OF A QUANTUM WAVE IMPEDANCE APPROACH FOR 1D INFINITE PERIODIC MEDIA

Orest Hryhorchak

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,
Ivan Franko Lviv National University of Lviv
Orest.Hryhorchak@lnu.edu.ua

Our objective is to demonstrate the applicability of a quantum wave impedance approach in describing periodic structures, commonly used as models for crystals. To solve a quantum-mechanical problem of an electron which is subjected to a periodic potential caused by positive ions even in a case of omitting an electron–electron interaction is feasible only for specific forms of such potentials. Therefore, developing an effective approach for investigating models with periodic potentials is crucial for practical applications.

The approach, we used, involves reformulating the Bloch–Floquet theorem in terms of a quantum wave impedance. By doing so, we derive an expression for a quantum wave impedance function in the presence of a periodic potential. The resulting formula, when combined with matching conditions for the quantum wave impedance function, facilitates a more straightforward derivation of dispersion relations for quantum mechanical infinite periodic systems. To illustrate our methodology, we apply it to two specific models: the infinite Dirac comb model and the Kronig–Penney model. Through these examples, we demonstrate the effectiveness of our approach in describing the behavior of non-interacting electrons in one-dimensional periodic media.

МОДЕЛЬ ІЗИНГА У СТАТИСТИЦІ РЕНІ

В. В. Ігнатюк, А. П. Моїна

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

Проведено дослідження термодинамічних характеристик одновимірної моделі Ізинга у статистиці Рені. На відміну від традиційного підходу [1–3], коли система знаходиться в наперед визначеному фіксованому оточенні скінченного розміру, ми розглядаємо в якості резервуара певну частину самої досліджуваної системи. Наклавши умови, щоб внутрішня енергія ланцюжка спінів

у статистиці Рені U_R дорівнювала внутрішній енергії у мікrokанонічному ансамблі U_{micro} , а “фізично спостережувана” [2] температура T_R співпадала з температурою T_{micro} , ми отримуємо систему трансцендентних рівнянь для визначення параметра Рені q та множника Лагранжа T , пов’язаного з температурою системи. Параметри q^* та T^* , як розв’язки цієї системи рівнянь, знаходяться при умові максимуму ентропії Рені S_R .

У загальному випадку ці параметри є функціями довжини ланцюжка L та кількості пар різнонапрямлених спінів M , яка при фіксованому розмірі усїєї системи N визначає її температуру T_{micro} . Показано, що обидва параметри мають стрибок при збільшенні розміру ланцюжка, після чого ентропія S_R стає неадитивною функцією L . Є підстави вважати, що даний стрибок визначає ентропійний фазовий перехід, який при значеннях $\varepsilon = 1 - q \ll 1$ є добре вивченим [1]. Однак, на відміну від традиційної термостатистики Рені [3], ми можемо описувати поведінку системи в усїй області значень параметра q : від $q \rightarrow 1$, що відповідає канонічному розподілу Гіббса, до $q \rightarrow 0$, що відповідає мікrokанонічному розподілу.

Окремо розглянуто можливість відтворення температурної залежності $U_R(T_R)$, максимально наближеної до $U_{\text{micro}}(T_{\text{micro}})$, коли вибирається та фіксується лише одна пара розв’язків (q^* , T^*). Результати обчислень показують, що надійне відтворення можливе лише в області $L < L_{\text{cr}}$, коли ще зберігається адитивна поведінка ентропії.

- [1] A. G. Bashkurov, in: *Chaos, Nonlinearity, Complexity: The Dynamical Paradigm of Nature* (Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, 2006), pp. 114–161.
- [2] E. Ruthotto. Physical temperature and the meaning of the q parameter in Tsallis statistics, Preprint arXiv: cond-mat/0310413v1.
- [3] A. S. Parvan, T. S. Biró. Rényi statistics in equilibrium statistical mechanics, *Phys. Lett.* **374**, 1951 (2010).

ОБЕРТОВА ДИНАМІКА ДИПОЛЬНИХ ЧАСТИНОК В ЕЛЕКТРОСТАТИЧНОМУ ПОЛІ З УРАХУВАННЯМ РЕАКЦІЇ ВИПРОМІНЮВАННЯ

А. Дувір'як

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

На основі умови балансу моменту імпульсу сформульовано рівняння руху дипольної композитної частинки як твердого тіла в електростатичному полі з урахуванням крутного моменту реакції випромінювання. Вищі похідні у правій частині редуковано з допомогою незбурених рівнянь Ойлера та їх диференційних наслідків. Для частинки з аксіально-симетричним еліпсоїдом інерції рівняння руху лінеаризовано в околі нерухомих точок, здійснено аналіз стійкості системи та її характеристичних частот. Показано, що частинка із швидким власним обертанням може перейти у режим “сплячої” дзиґи. Якщо ж композитну частинку розглядати як гантель із протилежними зарядами на кінцях або, загальніше, як поляризований тонкий стрижень, то система зводиться до збуреного сферичного маятника. Така модель аналізується методом усереднення нелінійної динаміки. Показано, що для швидкого обертання дзиґи характерне степеневе сповільнення, яке асимптотично переходить в експоненційне загасання коливань диполя навколо напрямку його рівноваги (тобто, зовнішнього поля). Як приклади розглядаються композитні частинки з великим перманентним дипольним моментом, такі як целюлозні нанокристали та DAST-нанокристали. Здійснено оцінку ефективності стабілізації таких частинок у зовнішньому полі.

PHASES OF BOSE–FERMI MIXTURES IN $4 - \epsilon$ DIMENSION

V. Pastukhov

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

We discuss universal properties of strongly interacting mixtures of bosons and spin-polarized fermions in dimension close to $d = 4$. Exactly in four dimensions the system possesses a stable phase with dimers, composed of one bosonic and one fermionic atoms, and the nondimerized fermions. At some critical density of bosons the BEC transition emerges signaling an instability of the mixed state. A small ϵ completely changes the phase diagram of the system enriching it with various p -wave fermionic superfluids. A further increase of bosonic density leads to formation of the three-component mixture with the fermions, dimers and trimers involved.

ЗАПЛУТАНІСТЬ СПІНУ $S = 1$ З ІНШИМИ СПІНАМИ У ГРАФОВОМУ СТАНІ ДЛЯ РІЗНИХ ПОЧАТКОВИХ СТАНІВ СПІНІВ

Ростислав Колесник

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

Знайдено заплутаності спіну $S = 1$ з іншими спінами у графовому стані враховуючи його ступінь вузла. Заплутаності знайдено використовуючи ентропію фон Неймана для ступенів вузла $k = 1, 2, 3$. Ступінь вузла $k = 1$ ми утворюємо за допомогою оператора еволюції $U_{12} = e^{i\alpha S_1^x S_2^x}$, подіявши ним на початковий стан $|\psi_0\rangle = |000\dots 0\rangle$. Ступені вузла вищого порядку утворюємо добутком подібних операторів еволюції. Оскільки такі оператори еволюції комутують між собою, то ми можемо діяти ними на початковий стан $|\psi_0\rangle$ в довільному порядку. Виявлено, що матриця густини для досліджуваного спіну у графовому стані завжди зводиться до однакової форми. Побудовано залежність заплутаності від параметра еволюції для кожного ступеня вузла. Знайдено середню заплутаність для усіх ступенів вузла та побудовано залежність середньої заплутаності від ступеня вузла. Аналогічні обчислення були проведені також для випадку, коли досліджуваний l -тий спін знаходиться у стані $|1\rangle$, тобто початковий стан всіх спінів задається наступною хвильовою функцією: $|\psi_0\rangle = |000\dots 1\dots 0\rangle$.

DETAILED PHOTOIONIZATION MODELING OF THE NEBULAR ENVIRONMENT IN DWARF GALAXIES

B. Melekh, O. Buhajenko, I. Koshmak

Department of Astrophysics, Ivan Franko National University of Lviv

Photoionization modeling allows us to determine the ionization structure of nebular plasmas surrounding the central active star formation region in a dwarf galaxies. Such modeling is based on spatial distributions of gas density, chemical abundances, and temperature in the superwind region provided by chemo-dynamical simulations (ChDS) of such objects. We perform the multicomponent photoionization modeling (MPhM) of the ionized nebular gas with a detailed calculation of the diffuse ionizing radiation (DCDIR) transfer using 2-D ChDS result of a dwarf galaxy. To reproduce the relative intensity of important emission lines, a thin dense shell (TDS) was artificially added between the superwind region and the outer part of the nebular environment. Emissivities and opacities obtained in this way for emission lines and continuum are used in the following iterations to calculate the diffuse ionizing radiation fluxes in a detailed way with adaptive selection of integration steps.

After the convergence of the ionization structure (spatial distributions of gas density and temperature as well as ionization fractions of chemical elements and emissivities of important emission lines), the modeling ionization structure (IoS) was analyzed. It was concluded that the IoS of the nebular environment is quite different from the one calculated in the popular and fast OUTW approximation.

So-called diagnostics T_e - and R_{23} -methods were used to derive the chemical abundance of oxygen based on MPhM+DCDIR emission lines obtained for a synthetic small central aperture as well as a long slit and tested for reproducing the oxygen abundance assumed in the model. Also, we tested the popular Kennicutt's estimator for star formation rate using the H_α MPhM+DCDIR luminosity.

STRUCTURAL FEATURES AT FORMATION OF STRETCHABLE ELECTRONICS SYSTEMS ON THE BASE LIQUID In–Ga–Sn AND MAGNETIC NANOPARTICLES

S. Mudry¹, I. Shtablavyi¹, M. Dudek², M. Marc², W. Wolak² A. Drzewinski²

¹Department for Physics of Metals, Ivan Franko National University of Lviv,

²Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland

Gallium-based alloys due to their low melting point attract the attention of researchers in various areas of industry, among which is also flexible electronics, revealing significant progress over recent years. In this work we present the results on investigation of possibilities to use liquid In–Ga–Sn alloy of ternary eutectic composition as functional element for creating of stretchable electronics systems, containing the magnetic nanoparticles. A few rows of nanoparticles, distance between which was of nanoscale size were arranged on the surface of thin polymer film and space between these rows was filled with liquid In–Ga–Sn. Such system can be used as active element in various devices, in which current in metallic melt excite a spin wave in row of magnetic nanoparticles. Creating the optimal thermodynamic and kinetic conditions for spin wave excitation and their passage is very important problem. On that reason at the first stage we have investigated the structure changes upon mixing of magnetic nanoparticles with In–Ga–Sn eutectic melt.

It was shown from X-ray diffraction data that there are no significant changes in structure in molten alloy and nanoparticles. But it should be noted that size of structural units (clusters) in melt is somewhat less due to contact with nanoparticles. Most probably that it is more revealed at the melt-nanoparticles boundaries. Such features, concluded from XRD-results are also confirmed by electroconductivity and DSC-measurements.

LOCAL STRUCTURE AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF COMPLEX LEAD SILICATE GLASS DOPED WITH Cu

*I. I. Kindrat¹, B. V. Padlyak^{1,2}, Y. O. Kulyk³, A. Drzewiecki¹, Y. S. Hordieiev⁴,
V. I. Goleus⁴, R. Lisiecki⁵*

¹Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland

²Vlokh Institute of Physical Optics, Lviv, Ukraine

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

⁴Department of Ceramics, Glass and Construction Materials, Ukrainian State University of Chemical Technology, Dnipro, Ukraine

⁵ Division of Optical Spectroscopy, Institute of Low Temperature and Structure Research of the PAS, Wrocław, Poland

The glass with the basic composition $0.521\text{PbO}-0.371\text{SiO}_2-0.068\text{ZnO}-0.027\text{K}_2\text{O}-0.013\text{BaO}$ doped with CuO (or PbSiZnKBaO:CuO) was obtained by the standard melt quenching method and characterized by XRD, EPR, IR transmission, optical absorption, and photoluminescence (emission and excitation

spectra and decay kinetics) techniques [1]. The glassy-like XRD pattern of the PbSiZnKBaO:CuO glass was analysed in order to obtain the radial distribution function. Average interatomic distances and coordination numbers for SiO_4 and PbO_n ($n = 4 - 6$) structural units as well as Pb-Pb interatomic distances in the network of the studied glass were determined. The observed characteristic axially-symmetric EPR spectrum of the Cu^{2+} ($3d^9$, $^2D_{5/2}$) paramagnetic ions was adequately described by the spin Hamiltonian formalism. The IR transmission spectrum of the PbSiZnKBaO:CuO glass in the spectral range of 400–4000 cm^{-1} was registered and analysed.

The optical absorption spectrum shows a broad band with a maximum around 870 nm attributed to the $^2B_{1g} \rightarrow ^2B_{2g}$ transition of Cu^{2+} ions. By analysing the fundamental absorption edge, the optical band gap and the Urbach energy of the PbSiZnKBaO:CuO glass were evaluated. Photoluminescence spectra (excitation and emission) and decay kinetics of the studied glass were registered and interpreted. The weak emission band in the blue spectral range with a luminescence lifetime of 0.56 μs is ascribed to the $3d^9 4s^{-1} \rightarrow 3d^{10}$ transition of Cu^+ ($3d^{10}$, 1S_0) ions. An intense broad emission band in the green spectral range with very fast decay kinetics was attributed to the intrinsic luminescence as a result of band-to-band electron-hole recombination. The CIE chromaticity diagram for Cu^+ emission and intrinsic luminescence in the studied glass was drawn and discussed.

- [1] B. V. Padlyak, I. I. Kindrat, Y. O. Kulyk, Y. S. Hordieiev, V. I. Goleus, R. Lisiecki, Mater. Res. Bull. **158**, 112071 (2023).

LONG-WAVELENGTH PROTEIN CRYSTALLOGRAPHY AT DIAMOND LIGHT SOURCE

V. B. Mykhaylyk

Diamond Light Source, Harwell Campus, Didcot, UK

The long wavelength I23 beamline at Diamond Light Source stands out as an exceptional facility designed for advancing the resolution of crystallographic phase problems. Its primary focus lies in conducting X-ray diffraction (XRD) experiments in proximity to the atomic absorption edges of light atoms naturally present in proteins. Operating within a core wavelength range spanning 1.2 to 5 Å, this beamline provides a valuable experimental setup that complements the offerings of five XRD beamlines at Diamond Light Source. To mitigate absorption effects, the entire beamline, including the end station equipped with a goniometer and detector, functions within a vacuum environment ($< 10^{-7}$ mbar). The cooling process for samples during storage, transfer, and data collection is executed through a network of conductive links connecting pulse tube cryocoolers with sample storage and the kappa goniometer. Featuring a large cylindrical Pilatus 12M detector, the beamline facilitates access to diffraction data up to $2\theta = \pm 90^\circ$, coupled with the absence of X-ray scattering, ensuring superior quality diffraction data.

The beamline supports a diverse array of phasing experiments, including sulphur/phosphorus single wavelength anomalous dispersion (S/P-SAD). This versatility extends to recent results obtained from the beamline, and discussions will delve into the newfound possibilities for macromolecular crystallography, particularly with the extension of the wavelength range towards the sulfur and phosphorous K-absorption edges.

Examples showcasing the identification of biologically crucial ions such as Ca^{2+} , K^+ , or Cl^- through anomalous contrast will be presented. Additionally, insights into structures solved on the beamline based on the anomalous signal from elements like S, Cl, I, K, Ca, V, etc., will be explored.

NUMERICAL GROUND STATE ENERGY PREDICTION VIA NEURAL VARIATIONAL MONTE CARLO WITH EVOLUTION STRATEGIES

M. Moroz, O. Bougyra

Department for Solid State Physics, Ivan Franko National University of Lviv
e-mail: michael08840884@gmail.com

Variational Monte Carlo (VMC) is a well-studied method originating in the late 1940s, although has only become prominent in the 1970s with the advent of more powerful computers and more powerful algorithms. Usually, it has only been used for computing the initial wavefunction ansatz to then use in Diffusion Monte Carlo (DMC) methods to get a refined ground state energy prediction. The main limiting factor of VMC historically has been its functional form and optimization method, and while there have been improvements such as using Jastrow factors, backflow transformations, stochastic reconfiguration etc., it has still been limited in its expressiveness and performance. Nowadays with the rapid progress of neural network models we can optimize huge parametric functions to any kind of data with any desired precision, with the hardware being more and more optimized for such kinds of computation.

Quite recently, it has been proposed and shown that one can use such neural networks as the base ansatz for a wave function, and with the close similarity of stochastic gradient descent optimization methods with VMC optimization methods is has been a very natural progression to use the machine learning toolset to optimize such ansatzes to a very high level of accuracy even without using DMC. Some of the more prominent recent advances include reaching chemical accuracy on a set of molecules using a model called FermiNet by Pfau et al. [1], computing excited state energies [2], computing band spectra of real solids in second-quantization formalism [3] etc.

In this study, we introduce a novel approach for optimizing neural network wave function ansatzes using Evolution Strategies (ES) within a VMC framework. Evolution Strategies allow for effective optimization of challenging functions inherent in many-electron systems.

Our ES-VMC can predict the ground state energy of simple systems with accuracy higher than Hartree-Fock methods. For instance, in the case of predicting Lithium, our method achieved an energy prediction of -7.45 Hartree, closely approximating the exact energy of -7.47 Hartree. Similarly, for Methane our method yielded -40.292 Hartree against the exact value of -40.514 Hartree, demonstrating a 0.5% error margin. These results underscore the potential of ES-VMC as a viable alternative for the classical optimization methods applied in VMC. The ability to optimize functions without their gradient allows this method to be both faster and be capable of optimizing more challenging functional forms of different ansatzes.

[1] D. Pfau, J. S. Spencer, A. G. D. G. Matthews, W. M. C. Foulkes, *Phys. Rev. Res.* **2**, 033429 (2020).

[2] D. Pfau, S. Axelrod, H. Sutterud, I. von Glehn, J.S. Spencer, arXiv:2308.16848 [physics.comp-ph] (2023).

[3] N. Yoshioka, W. Mizukami, F. Nori, *Commun. Phys.* **4**, 106 (2021).

SEMICLASSICAL LIMIT OF QUANTUM LOGIC: INFORMATION LOSS

Maksym Teslyk^{1,2}, Olena Teslyk¹

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine

²University of Oslo, Norway

e-mail: machur@ukr.net

Quantum logic expressions are reduced to their classical counterparts by imposing the semiclassical limit $\hbar \rightarrow 0$. Estimation of the emerging information loss for any gate from the complete set is presented. The largest loss is observed for the expressions consisting of non-commuting operators. This allows to consider non-commutativity as a quantum speed-up resource. The obtained results are illustrated with the reduction of quantum discrete Fourier transform and Grover search algorithms.

КВАНТОВІ ФЛУКТУАЦІЇ ТА КВАНТОВИЙ ХАОС ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ: ПОЗАЧАСОВО ВПОРЯДКОВАНІ КОРЕЛЯЦІЙНІ ФУНКЦІЇ ДЛЯ МОДЕЛІ ФАЛІКОВА–КІМБАЛА

А. Швайка

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів

Проведено дослідження квантових флуктуацій і квантового хаосу локалізованих станів для сильноскорельованих електронних систем. Зокрема, для моделі Фалікова–Кімбала, яка описує систему взаємодійних колективізованих та локалізованих електронних станів, проведено розрахунок позачасово впорядкованих кореляційних функцій, які слугують мірою поширення/перемішування квантової інформації. Встановлено три режими поведінки системи. Для малих значень Кулонової взаємодії, система швидко хаотизується внаслідок термічних флуктуацій. Для більших значень Кулонової взаємодії, логарифмічна похідна (відповідник показника Ляпунова) проявляє коливання насичення, які можна пов'язати з резонансами Рюеля–Поллікотта для стохастичних динамічних систем. Для ще більшої Кулонової взаємодії, динаміка системи ускладнюється з руйнуванням резонансів Рюеля–Поллікотта при великих часах.

UNEXPECTED LOCAL DENSITY BIMODALITY IN 2D HARD DISKS UNDER EXTREME CONFINEMENT

Andriy Trokhymchuk^{1,2}

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

²Institute for Condensed Matter Physics NASU, Lviv, Ukraine

By using *NVT* computer simulations and cell theory we show that two dimensional (2D) array of hard disks confined laterally within a narrow (quasi-1D) hard wall channel of the width that commensurates the vertical triangular lattice, possesses a bimodal distribution of the local density not yet been reported neither for the bulk nor for confined systems of hard disks.

We argue that simplicity of a quasi-1D system of hard disks enables us to get a much deeper and more quantitative insight into both the gas-liquid and liquid-to-solid transformations observed and discussed in condensed matter.

СИГНАЛ В ЛІНІЇ ГІДРОГЕНУ 21 см З РАННЬОГО ВСЕСВІТУ: ТЕОРЕТИЧНІ ПЕРЕДБАЧЕННЯ І СПОСТЕРЕЖНІ ПЕРСПЕКТИВИ

Б. Новосядлий, Ю. Кулініч

Астрономічна обсерваторія, Львівський національний університет імені Івана Франка

Аналіз формування лінії надтонкої структури 21 см нейтрального гідрогену у ранньому Всесвіті, в епохи Темних віків, Космічного світанку та Реіонізації, вказує на три спектральні особливості, детектування яких може стати важливим космологічним тестом щодо природи частинок темної матерії чи величини первісного магнітного поля. У стандартній Λ CDM моделі цими спектральними особливостями є лінія поглинання на частоті ~ 15 МГц, що формується в епоху Темних віків на червоних зміщеннях $80 \leq z \leq 90$, лінія поглинання на частоті ~ 80 МГц, що формується в епоху Космічного світанку на $12 \leq z \leq 20$ та лінія випромінювання на частоті ~ 120 МГц, що формується в епоху Реіонізації на $6 \leq z \leq 10$. Лінія, що формується в епоху Темних віків є чутливою до додаткових механізмів іонізації та нагрівання, які мають місце в моделях з розпадною/самоанігіляційною темною матерією чи за наявності первинного магнітного поля, а також до додаткового охолодження в моделях з негравітаційною взаємодією баріонної і темної матерії. Сигнал у цій лінії має глобальний характер — однаковий у різних напрямках на небі. Лінія з епохи Космічного світанку визначається локальним спектральним енергетичним розподілом випромінювання перших джерел світла, зокрема, співвідношенням Ly_α і Ly_c квантів, яке визначає положення лінії, її характер (поглинання чи випромінювання) та інтенсивність. Це означає, що сигнал в лінії 21 см гідрогену з цієї епохи не є глобальним, що пояснює різницю в результатах експериментів EDGES (2018) і SARAS 3 (2022). Оцінка очікуваних сигналів в лінії 21 см нейтрального гідрогену з епохи Темних віків і Космічного світанку вказує на можливості їх детектування сучасними найчутливішими телескопами декаметрового та метрового діапазону довжин хвиль наземного базування. Перспективними є проекти розташування телескопів для детектування цих сигналів на зворотній стороні Місяця з метою усунення завад техногенного характеру.

ION MIGRATION PATHWAYS IN CRYSTALS WITH SCHEELITE-TYPE STRUCTURE

Volodymyr Shevchuk, Ihor Kayun

Ivan Franko National University of Lviv, Department of Electronics and Computer Technologies
shevchuk@electronics.lnu.edu.ua

The data on computer calculation and stereo-atomic crystals structure analysis applied to AMO_4 ($A = Ba, Ca, Cd, Pb, Sr, Zn, Eu$; $M = W, Mo$) and solid solutions based on these compounds are presented. Possible migration 3D-paths and migration channels for W or Mo ions in scheelite- and wolframite-type suitable structures of AMO_4 were considered on nano-size level. The program package TOPOS for the calculation of the ion migration in real crystals was used. In our paper [1] the previous analysis on the pathways of W - or Mo -ion migration in scheelite-type crystals were presented. The four factors (structural, partial cationic substitution, temperature, and technological conditions of compound growth technique) as influence methods for change of the possible ion migration path up to formation of continuous the latter were ascertained. Usefulness of proposed approach as a tool for investigation of structural point defects was showed. The calculation and experimental data on ion migration in crystals are discussed.

[1] V. N. Shevchuk, I.V. Kayun, Electron. Inform. Technol. **19**, 3 (2022).

ВИСОКОТОЧНА ПОЛЯРИМЕТРІЯ КРИСТАЛІВ Rb_2SO_4

І. Пришко¹, Н. Фтомин¹, В. Стадник¹, Я. Шопа²

¹Кафедра загальної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка

²Університет кардинала Стефана Вишинського, Варшава, Польща

HAUP (High-accuracy universal polarimeter) поляриметри та споріднені з нею методики є найточнішими в сучасному оптичному експерименті і широко застосовується для вимірювання температурних та спектральних змін параметрів матеріалів (оптична активність, лінійне двопронезаломлення, лінійний та циркулярний дихроїзм). Високоточні поляриметри постійно удосконалюються, зокрема, використовуються ПЗЗ (прилади із зарядовим зв'язком) лінійки [1], застосовуються схеми з двома лазерами (два джерела світла з близькими довжинами хвилі — двопронезна поляриметриа [2]), тощо. Тому результати, отримані на основі поляриметричного експерименту характеризуються високою надійністю.

Основою нашої методики є вимірювання оптичного пропускання системи, яка складається з поляризатора зразка та аналізатора (система PSA Polarizer–Specimen–Analyzer). Відносна інтенсивність світла J , на виході з такої поляризаційної системи залежить від азимутів поляризатора (θ) та аналізатора (χ) і описується квадратичною функцією $J(\theta, \chi)$. Однією з особливостей методики поляриметрії є аналіз HAUP-мап (сукупність кривих другого порядку, які утворюються шляхом перерізу поверхні оптичного пропускання площинами однакової інтенсивності). Особлива увага приділяється, також, врахуванню параметрів недосконалості поляризаційних елементів (поляризатора та аналізатора), які використовуються при вимірюваннях. Оскільки поверхні зразків які використовуються в нашій методиці зазвичай характеризуються високою якістю, то доволі часто можуть спостерігатися ефекти багатократного відбивання світла.

Мета цієї роботи — поляриметриа кристалів Rb_2SO_4 (кристали групи K_2SO_4). Оптико-електронні дослідження параметрів цих матеріалів представлено у [3]. Вимірювання проводилися на комп'ютеризованому лазерному поляриметрі для трьох довжин хвилі випромінювання ($\lambda = 532, 635, 650$ нм). Використовуючи аналітичні співвідношення для кута нахилу мінімізованих інтенсивностей $\partial\chi/\partial\theta$, отримано температурні залежності величини $\cos\Gamma$ ($\Gamma = (2\pi/\lambda)d\Delta n$, d — товщина зразка, Δn — лінійне двопронезаломлення). Проаналізовано температурну еволюцію кута нахилу головних осей еліпсів на HAUP-мапах. Розраховано величину лінійного двопронезаломлення цих кристалів у температурному діапазоні від 20 до 100°C.

[1] A. Takanabe, H. Koshima, T. Asahi, AIP Adv. **7**, 025209 (2017).

[2] Y. Shopa, M. Shopa, N. Ftomyn, J. Appl. Cryst. **56**, 432 (2023).

[3] M. Ya. Rudysh, I. A. Pryshko, P. A. Shchepanskyi, V. Yo. Stadnyk, R. S. Brezvin, Z. O. Kogut, Optik **269**, 169875 (2022).

HARMONIC OSCILLATOR WITH A DELTA-FUNCTION POTENTIAL AT THE ORIGIN IN DEFORMED SPACE WITH MINIMAL LENGTH

M. I. Samar

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,

Ivan Franko National University of Lviv

In the general case of a deformed space with minimal length, we examine the 1D Schrödinger equation with a potential perturbed by a Dirac delta function. A Green's function technique is used to calculate an exact implicit expression, providing the impact of the 1D delta function potential on

the eigenvalues of bound states. Additionally, it is demonstrated that the weak coupling limit of this expression is in agreement with the perturbative treatment of the delta function. A few quantum systems are presented where the effect of adding a delta function potential on bound states can be precisely computed. We explicitly determine the exact transcendental equation for the bound state energies of a one-dimensional harmonic oscillator perturbed by a single point interaction.

ВПЛИВ ДОМІШКИ МАНГАНУ НА ОПТИКО-ЕЛЕКТРОННІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КРИСТАЛА СУЛЬФАТУ КАЛІЮ

В. Й. Стадник, П. А. Щепанський, Р. С. Брезвін

Кафедра загальної фізики, Львівський національний університет імені Івана Франка

Синтезовано якісний монокристал сульфату калію з домішкою мангану, визначено його кристалічну структуру, досліджено дисперсію показників заломлення та розраховано зонно-енергетичну структуру. З'ясовано, що кристалічну структуру домішкових кристалів K_2SO_4 можна розглядати як результат кратного гетеровалентного заміщення двох атомів K^+ на один атом Mn^{2+} та укладання колон з тетраєдрів SO_4^{2-} .

Показано, що дно зони провідності сформоване s - та p -станами атомів сірки та калію, а вершина валентної зони утворена p -станами кисню та s -станами кисню. Домішка мангану у густині станів кристала сульфату калію представлена вузьким інтенсивним піком d -електронів, що відповідає рівням домішки в забороненій зоні поблизу вершини валентної зони. Розрахована ширина забороненої зони домішкового кристала отримана з використанням GGA-PBE методу становить $E_g = 5.92$ еВ, тоді як чистого кристалу становить 5.20 еВ.

З'ясовано, що введення домішки спричиняє зміщення положення центрів УФ осциляторів в довгохвильову ділянку спектру, зменшення сили відповідних осциляторів, величин рефракції зв'язків та електронної поляризованості відносно чистих кристалів. Розрахований кількісний коефіцієнт анізотропії домішкового кристала вказує на зменшення його анізотропії порівняно з чистим кристалом.

LOCAL STRUCTURE AND SPECTROSCOPY OF THE $Li_2B_4O_7:Mn,Er$ GLASS

B. V. Padlyak^{1,2}, I. I. Kindrat¹, Y. O. Kulyk³, A. Drzewiecki¹, V. T. Adamiv², I. M. Teslyuk²

¹Institute of Physics, University of Zielona Góra, Poland

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

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

High quality glass with $Li_2B_4O_7:Mn,Er$ composition, containing 1.0 mol.% MnO_2 and Er_2O_3 impurities was obtained and studied by X-ray diffraction (XRD), electron paramagnetic resonance (EPR) and optical spectroscopy techniques for the first time. Local structure parameters (interatomic distances and coordination numbers) of the $Li_2B_4O_7:Mn,Er$ were derived from radial distribution function, calculated from XRD data. Analysis of EPR and optical spectroscopy (absorption, luminescence excitation, emission, decay kinetics) results shows the presence of $Mn^{2+}(3d^5)$, $Mn^{3+}(3d^4)$, and $Er^{3+}(4f^{11})$ ions in the $Li_2B_4O_7:Mn,Er$ glass network. Particularly, in the studied glass have been identified three types of the Mn^{2+} centres: single Mn^{2+} (1) centres in the strongly distorted sites of rhombic symmetry (ratio of rhombic and axial constants $|E/D| \leq 1/3$), single Mn^{2+} (2) centres in sites of almost cubic symmetry ($D \simeq 0$, $E \simeq 0$), and Mn^{2+} pair centres and their small clusters, coupled by magnetic dipolar and exchange interactions. Optical absorption spectrum of the $Li_2B_4O_7:Mn,Er$ glass shows a very broad intense band peaked at 467 nm that belongs to the ${}^5E_g(D) \rightarrow {}^5T_{2g}(D)$ transition of Mn^{3+} ions and a number of weak narrow lines belonging to $f - f$ transitions of the $Er^{3+}(4f^{11}, {}^4I_{15/2})$ ions. Emission

spectrum of the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Mn},\text{Er}$ glass exhibits a broad band corresponding to the ${}^4T_{1g}(G) \rightarrow {}^6A_{1g}(S)$ transition of Mn^{2+} ions. Photoluminescence emission and excitation spectra as well as decay kinetics of Mn^{2+} centres in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Mn},\text{Er}$ glass were discussed in comparison with corresponding results obtained for $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Mn}$ glass. Absence of characteristic Er^{3+} and Mn^{3+} photoluminescence in the $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Mn},\text{Er}$ glass is explained by proposed mechanisms of energy transfer from Er^{3+} to Mn^{2+} and Mn^{3+} ions.

Acknowledgments. This work was supported by the Ministry of Education and Science of Ukraine (scientific research project No. 0122U001833), realized in the Vlokh Institute of Physical Optics (Lviv, Ukraine).

ON RANK-ONE PERTURBATIONS OF PT -SYMMETRIC HAMILTONIANS

Oles Doboševych¹, Monika Homa², Rostyslav Hryniv^{1,2}

¹Ukrainian Catholic University, Lviv, Ukraine

²University of Rzeszów, Poland

e-mails: {rhryniv, doboševych} @ucu.edu.ua, mhoma@ur.edu.pl

Perturbation theory offers powerful methods to understand how small changes of Hamiltonians affect their spectral properties. Additive rank-one perturbations have attracted much attention since, on the one hand, they are simple enough to allow an explicit and often closed-form analysis and, on the other hand, they are reach enough to produce unexpected spectral effects.

In this talk, we demonstrate that generic rank-one perturbations of a given Hermitian Hamiltonian with discrete spectrum can create an arbitrary non-real spectrum. Even more surprising is the fact that a PT -symmetric rank-one perturbation of a Hermitian PT -symmetric Hamiltonian with discrete spectrum can produce a fairly generic set of complex bound states. We also discuss the inverse problem of constructing a rank-one perturbation with the desired spectral effect.

The talk is based on the papers [1, 2, 3].

[1] O. Doboševych, R. Hryniv, *Linear Algebra Appl.* **609**, 339 (2021).

[2] O. Doboševych, R. Hryniv, *Integral Equ. Oper. Theory* **93(2)**, 18 (2021).

[3] M. Homa, R. Hryniv, *J. Phys. A: Math. Theor.* **53**, 375202 (2020).

КВАНТОВА ТЕОРЕМА ЕРНШОУ

Юрій Яремко

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, Україна

У статті [1] на класичному рівні досліджена задача контролю поступального та обертального руху великої молекули чи наночастинки з постійним дипольним моментом за допомогою електричних та магнітних полів. Ці поля генеруються електродами та котушками певної конфігурації, які обрамлюють робочу камеру пастки. Завдання ускладнюється теоремою Ерншоу, яка забороняє утримання систем заряджених частинок (молекул чи наночастинок) тривимірним статичним полем у положенні стійкої рівноваги [2, §6.3]. В даній роботі, на прикладі молекули атома водню, розглядається квантовий опис проблеми. Використовуючи наближення Борна–Опенгеймера, знайдено електронний потенціал та описано вібрації протонів поблизу його мінімуму. Обертання

молекули моделювалось суперпозицією сферичних гармонік [2, 3]. Взаємодія виродженого власного стану вільної молекули із фіксованим моментом J

$$\Psi_J^{\text{rot}}(\theta, \varphi) = \sum_{M=-J}^J D_{JM} Y_J^M(\theta, \varphi), \quad (1)$$

із магнітним полем повністю знімає виродження, розщеплюючи спільну енергію обертального руху вільної молекули на $2J+1$ рівнів. Оскільки частоти обертального руху значно перевищують частоти, які характеризують рух центру мас, ми використовуємо квазікласичний підхід [3]: внутрішня динаміка розглядається як квантова, а рух центру мас описується класично. Квантове усереднення обертальних рухів призводить до класичного гамільтоніана із потенціалом, який є функцією модуля магнітного поля, а не окремих компонент з різними знаками, як це є в класичній теоремі Ерншоу.

Аналогічний результат отримуємо при дослідженні взаємодії статичного електричного поля із дворівневою системою

$$\Psi(\theta, \varphi; t) = e^{-iE_a t} \psi_a(\theta, \varphi) + e^{-iE_b t} \psi_b(\theta, \varphi), \quad (2)$$

скомпонованої із двох вироджених взаємно ортогональних станів

$$\psi_a(\theta, \varphi) = \sum_{M=-J}^J D_{JM} Y_J^M(\theta, \varphi), \quad \psi_b(\theta, \varphi) = \sum_{N=-J-1}^{J+1} D_{J+1,N} Y_{J+1}^N(\theta, \varphi). \quad (3)$$

Стан знормований на одиницю: $\langle \psi_a | \psi_a \rangle = \kappa$ та $\langle \psi_b | \psi_b \rangle = 1 - \kappa$ де параметр $0 < \kappa < 1$. Енергії обертального руху молекули водню дорівнюють $E_a = B_e J(J+1)$ (для стану ψ_a) та $E_b = B_e (J+1)(J+2)$ (для стану ψ_b). Тут $B_e = 29.3 \text{ cm}^{-1}$ — ротаційна константа молекули водню. Зовнішнє електричне поле знімає виродження. Після квантового усереднення отримуємо гамільтоніан руху центра мас із потенціалом, залежним від модуля електричного поля.

[1] M. Przybylska, A. J. Maciejewski, Yu. Yaremko, *New J. Phys.* **22**, 103047 (2020).

[2] R. V. Krems, *Molecules in Electromagnetic Fields* (John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, 2019).

[3] A. Hashemloo, C. M. Dion, *J. Chem. Phys.* **143**, 204308 (2015).

PHILOSOPHICAL, THEOLOGICAL AND CLASSICAL FOUNDATIONS OF MATHEMATICS

Taras Banakh

Department for Algebra, Topology and Fundamentals of Mathematics,
Ivan Franko National University of Lviv

We shall discuss the most basic 14 axioms that lie in the foundations of modern mathematics, their similarity with the Ten Commandments, analogies between constructing the mathematical universe from the empty set and creating our physical universe from the singularity, about materialism and idealism in mathematics, effects of Occam's razor on development of mathematics, classes and sets, and many other interesting things in mathematics that have philosophical nature.

PARTITION PROBLEM AND ITS SOLUTION WITH QUANTUM PROGRAMMING

Kh. P. Gnatenko, V. M. Tkachuk

Professor Ivan Vakarchuk Department for Theoretical Physics,
Ivan Franko National University of Lviv
e-mails: khrystyna.gnatenko@gmail.com, vltkachuk@gmail.com

A well-known problem in computer science and number theory is the partition problem. This problem involves dividing a set of numbers into two subsets in such a way that the sums of the numbers in the subsets are as nearly equal as possible. In this context, we propose a quantum algorithm for finding the absolute difference between the sums of subsets using quantum programming. Specifically, we demonstrate that this problem is connected to determining the energy of the ground state of a spin system described by the Ising model. For solving this problem quantum algorithms for detecting energy levels of spin systems can be used. The algorithms are presented in our recent papers [1,2].

[1] Kh. P. Gnatenko, H. P. Laba, V. M. Tkachuk, Eur. Phys. J. Plus **137**, 522 (2022).

[2] Kh. P. Gnatenko, H. P. Laba, V. M. Tkachuk, Phys. Lett. A **424**, 127843 (2022).

ЗАПЛУТАНІСТЬ КВАНТОВИХ СТАНІВ РЕЛЯТИВІСТСЬКИХ СИСТЕМ

В. М. Ткачук

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

Ми розглянемо запутаність квантових станів в рамках одночастинкового рівняння Дірака. Вивчається запутаність дискретних (спінових) та неперервних (координатних) змінних при вільному русі релятивістського електрона. Показано, що релятивізм призводить до додаткової запутаності квантових станів, яка зникає в нерелятивістській межі.