

---

# The Antiphysical Review

---

Founded and Edited by M. Apostol

112 (2005)

---

ISSN 1453-4436

## Cercetari teoretice fundamentale asupra unor probleme actuale de materie condensata (CERES, Mai 2001)

M. Apostol

Department of Theoretical Physics, Institute of Atomic Physics,  
Magurele-Bucharest MG-6, MG-35, Romania  
email: apoma@theory.nipne.ro

### Abstract

Obiectivele stiintifice ale proiectului: 1. Proprietati critice in sisteme de faze multi-componente 2. Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari 3. Feromagnetism laticial cu interactie de trei corpuri 4. Scheme de calcul aproximativ pentru energia de legatura a atomilor grei.

In sistemele de faze multicomponente se urmareste descrierea mecanismelor de tranzitii de faza si a comportarii critice, in vederea extinderii cunostintelor referitoare la sisteme unicomponente existente la stadiul actual. In acest scop se vor investiga diferentele tipice dintre comportarea generata de interactii de scurta distanta si interactii de lunga distanta, efectele anizotropiei uniaxiale, aproximatia cimpului cristalin, limitele ei de valabilitate si metode de imbunatatire a acestei aproximatii. Se vor avea de asemenea in vedere sisteme cu dimensionalitate scazuta si modele exact solubile, ca teste pentru metodele generale de abordare a compozitiei statistice a acestor sisteme complexe. Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari se va studia pe baza extinderii descrierii cuasi-clasice si a teoriei Thomas-Fermi liniarizate, urmarindu-se in particular energia de legatura, efectele structurale geometrice, coeziunea suprastructurilor atomice si limitele de aplicabilitate ale acestor metode noi si originale. Pe langa aplicatiile lor la sisteme moleculare complexe, precum proteinele, sistemele feromagnetice cu interactii multi-particula constituie totodata teste pentru metodele fizico-matematice specifice. Posibile tranzitii de faza feromagnetice vor fi studiate in astfel de sisteme, in special sisteme cu interactii ternare, urmarindu-se in special analogia lor cu sistemele de spini Ising. Cresterea cerintei de cunostinte asupra energiei de legatura a atomilor grei impune abordarea eficienta cu metode aproximative a acestei probleme, bazata pe corectii cuantice la rezultate semi-clasice. Se va urmari eficientizarea acestor metode de calcul in comparatie cu scheme de calcul clasice.

**Pe plan national si international.** In fizica starii condensate a materiei se constata recent un interes deosebit pentru studiul fenomenelor critice in sisteme complexe si pentru fizica nanostructurilor si agregatelor supra-atomice. Aceste doua orientari tematice generale sint considerate la ora actuala printre cele mai importante directii de cercetare stiintifica in domeniul starii condensate a materiei. Obiectivele generale cunoscute in aceste directii consta in identificarea caracteristicilor statistice de comportare a sistemelor complexe in vecinatate punctului critic, si in identificarea naturii si proprietatilor fizico-chimice ale agregarii atomilor, in contextul general al legaturii chimice. La momentul actual comportarea critica a sistemelor unicomponente este relativ cunoscuta, cel putin in conditii simple. De asemenea, sint cunoscute o serie de regularitati, obtinute prin

studii experimentale si o serie de modele teoretice, in ceea ce priveste natura legaturii chimice in clusteri atomici, in special in clusteri de marime relativ mica. Recent, s-au identificat noi metode matematice de abordare a comportarii sumei de stare si a marimilor derivate, in special cu tehnici din teoria functiilor de variabila complexa, care se dovedesc mai puternice si cu un grad mai mare de generalitate si de cuprindere. Ca urmare, este de dorit sa se urmareasca efectul aplicarii acestor tehnici de abordare teoretica in studiul sistemelor multicomponente complexe, multifazice si cu interactii multi-particula. In particular, caracteristici mai putin cunoscute chiar in sisteme simple, precum anizotropia uniaxiala, cipul cristalin, raportul dintre interactia de lunga distanta si cea de scurta distanta, sint tratabile cu astfel de metode. In plus, testarea unor modele exact solubile, sau comparatia rezultatelor cu cele referitoare la sisteme exact solubile similare, constituie o directie de cercetare importanta pentru estimarea gradului de utilizare al acestor metode. In domeniul agregarii atomice s-au evidentiat recent rezultate ce configureaza o teoria generala consistenta de abordare a structurilor supra-atomice, bazata pe descrierea quasi-clasica. S-a identificat in aceasta directie posibilitatea separarii contributiei quasi-clasice la energia de legatura de contributia energiei de schimb, si exista indicii referitoare la formularea self-consistentă a unei scheme generale computationale pentru includerea efectelor cuantice. S-au obtinut in aceasta directie rezultate incurajatoare in cazul unor modele simple, bazate pe ioni punctiformi caracteristici unor metale simple. Aceste rezultate urmeaza a fi extinse, testate in privinta stabilitatii structurilor egoemtrice precise si conditionate ca punct de plecare pentru efecte de ordin superior. Cercetarea stiintifica in directia comportarii critice in sisteme complexe se desfasoara cu rezultate notabile in multe centre internationale, precum Leuven-Belgia, Saclay-Franta, Texas University-USA, centre aflate in contact si in colaborare cu participantii la proiect din tara. Domeniul clusterilor atomici este abordat cu rezultate importante la Georgia University-USA, Gottingen-Germania, precum si in tara in Departamentul de Fizica Teoretica-IFA. Un cluster sintetizat recent la Max-Planck-Institut fur Strommungsforshung Gottingen a fost analizat teoretic si i s-a determinat structura, de catre participantii la prezentul proiect. Rezultatele acestor cercetari teoretice pot fi utilizate in principiu de catre toti cei interesati in respectivele domenii si directii de cercetare, prin publicatii, comunicari, colaborari, participari la manifestari stiintifice.

**Obiective.** In prima perioada a desfasurarii proiectului (sfirsitul anului 2001 si prima jumatate a anului 2002) se va urmări obiectivul 1. Proprietati critice in sisteme de faze multi-componente, in care se vor solutiona probleme legate de natura matematica a sumei de stare, de singularitatile derivatelor ei de grad superior, in contextul anizotropiilor (in primul rind al anizotropiei uniaxiale), si se va lamuri totodata rolul cimpului cristalin si limitele lui de valabilitate in ipoteza fazelor multi-componente. Un aspect deosebit de interesant ce se va clarifica este diferenta in comportarea proprietatilor statistice adusa de interactiile de raza lunga de actiune in raport cu interactiile de raza scura de actiune. Este evident ca acest aspect contribuie esential la relevanta rezultatelor pentru sisteme realiste in care fortele de natura electrica (coulombiene) joaca un rol primordial. Este de asteptat ca in prima parte a anului 2002 sa se remarce pe plan international o crestere a publicatiilor in aceasta directie, asa cum indica abundenta preprinturilor de la xxx.archive-Los Alamos, ceea ce va spori interesul pentru obiectivul propus de prezentul proiect. Rezultatele obtinute in cadrul solutionarii acestui obiectiv vor fi prezentate sub forma unui articol stiintific publicabil in jurnalele de specialitate. Acest obiectiv se incadreaza in obiectivele generale ale programului de sporire a cunostintelor in domeniile cercetarii fundamentale, si corespunde prioritatilor programului de abordare a temelor de mare interes pe plan international. In partea a doua a anului 2002 se va avea in vedere obiectivul 2. Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari. In cadrul acestui obiectiv se va solutiona problema energiei de legatura a formatiilor supra-atomice in cadrul aproximatiei semi-clasice, urmarindu-se in special rolul energiei de schimb si participarea ei la stabilirea echilibrului. Problema generala in cadrul acestei abordari

se refera la un sistem de sarcini electrice in interactie, format din ioni incarcati electric pozitiv si un ansamblu de electroni, astfel incit sarcina totala este zero (sistem neutru). Interactia coulombiana include atat respingerea electron-electron, respingerea ion-ion cit si atractia electron-ion, urmarindu-se posibilitatea echilibrului, si in general, a legaturii atomice. Este binecunoscuta in aceasta chestiune asa-numita teorema "no-binding" ce interzice legarea unor sisteme clasice de sarcini electrice. Pe baza rezultatelor referitoare la descrierea quasi-clasica si a teoriei linearizate Thomas-Fermi se vor indica limitele acestei teoreme referitoare la sisteme clasice, si se va analiza asa-numita aproximatie quasi-clasica (sau semi-clasica) in care este valida teorema mentionata. Se vor obtine de asemenea structuri geometrice cu sarcini ionice punctiforme, atat in stare fundamentala cit si isomerii de forma corespunzatori, si se vor analiza regularitatile legate de numerele magice geometrice (sau structurale) intr-un sir de clusteri de metale simple suficient de relevant. Se va clarifica de asemenea natura energiei de coeziune in raport cu sistemul constituent de atomi identici separati la infinit. Rezultatele vor fi redactate in forma unui articol stiintific publicabil in revistele de specialitate. Interesul pentru problema clusterilor atomici se afla in crestere in perioada actuala, datorita, pe de o parte, aplicatiilor acestor clusteri in nanizari electronice, cit si, pe de alta parte, chestiunilor principale ridicate de legatura chimica. Legatura chimica este derivata la ora actuala din primele principii pentru molecule relativ mici (maximum 20 atomi identici de Au, de exemplu), cu probleme legate de convergenta algoritmilor de calcul si a self-consistentei rezultatelor numerice. Obiectivul prezent isi propune sa formuleze problema legaturii chimice de aceasta natura pina la clusteri cu un numar mare de atomi (80 atomi identici de metale simple), in cadrul aproximatiei quasi-clasice, formulind totodata si o schema consistenta de algoritm de calcul ce are in vedere includerea efectelor de ordin superior ce tin de corectiile cuantice. Din acest punct de vedere obiectivul concorda cu obiectivele generale ale programului referitoare la cresterea gradului de eficientizare a metodelor fundamentale de sporire a cunostintelor fizico-chimice intr-un domeniu prioritar pe scara internationala, acela al clusterilor si nanostructurilor. In partea a treia a desfasurarii proiectului (prima jumatate a anului 2003) se va rezolva obiectivul 3. Feromagnetism laticial cu interactie de trei corpuri. Acest obiectiv vizeaza stabilirea analogiei dintre modelele clasice exact solubile si quasi-exact solubile ale feromagnetilor de tip Ising si interactia moleculara dintre specii multiple pe sisteme laticiale cu interactie multi-particula. Problema este relevanta atat pentru proprietatile statistice ale macromoleculor, cum ar fi structurile moleculare proteinice, dar ea prezinta si un considerabil interes teoretic prin exploatarea acestor analogii pe baza utilizarii metodelor complexe de tratare a sistemelor feromagnetice. Se va clarifica rolul curbilor parametrice de punct critic, si relevanta structurii lor topologice asupra proprietatilor statistice. In particular, se va avea in vedere comportarea sub-critica si supra-critica, si rolul efectelor geometrice in natura generala a tranzitiilor de faza. Se va urmari cu precadere efectul numarului de specii moleculare multiple, rolul dimensionaliattii si efectul probabilitatilor de agregare-dezagregare moleculara asupra comportarii statistice a sistemului. Acest obiectiv se incadreaza in curentul general actual in cercetarea stiintifica internationala referitor la cinetica fizico-chimica a sistemelor reactive complexe, incadrindu-se din acest punct de vedere atat in obiectivele generale ale programului cit si in prioritatile lui. Rezultatele obtinute in cadrul obiectivului vor fi redactate sub forma unui articol stiintific publicabil in revistele de specialitate. In a doua jumatate a ultimulu an al proiectului (2003) se va aborda obiectivul 4. Scheme de calcul aproximativ pentru energia de legatura a atomior grei. Atomii grei constituie un punct dificil in abordarile clasice privitoare la energia lor de coeziune, precum si la proprietatile lor uni-electronice. Metodele traditionale cunoscute sub numele de metode "ab-initio", sau metodele densitatii functionale, prezinta dificultati serioase in acest caz, legate de convergenta iteratiilor numerice, self-consistentia rezultatelor, separabilitatea functiei de unda in functii de unda uniparticula, etc. Totodata, rezultatele aproximative bazate pe metoda Thomas-Fermi, necesita evaluarea unei serii asimptotice, ceea ce ridica, pe langa dificultatile inerente de calcul direct, probleme

legate de convergenta, de eroare, si de valabilitate a rezultatelor numerice in cadrul unei scheme consistente de calcul in care astfel de metode intra ca stadii de input in vederea unor analize mai laborioase (de exemplu in calculul potentialelor de ioizare, etc). Interesul pentru acest tip de problema decurge din cercetariel astrofizice recente, dar si din studii moleculare si atomice de laborator legate de probleme de mare interes precum condensarea Bose-Einstein a atomilor grei. Pe de alta parte, metoda de descriere quasi-clasica dezvoltata recent pentru clusteri atomici si sisteme atomice moelculare si supramoelculare, este aplicabila atomilor grei, in anumite limite. Studiul acestor limite, si investigarea concreta a rezultatelor ce se pot obtine cu aceasta metoda in cazul atomilor grei constituie obiectivul de interes major in acest context. Se va calcula energia de legatura atomica in aproximatia quasi-clasica incluzind corectii cuantice derivate in descrierea quasi-clasica, si se vor compara rezultatele cu cele obtinute prin metoda seriilor asimptotice. Se va clarifica natura exacta a aproximatiei semi-clasice in acest caz si implicatiile ei asupra teoremei "no-binding", stabilindu-se in acest fel o consonanta cu obiectivul numarul 2 al prezentului proiect. Coroborarea rezultatelor in aceste cazuri este de natura sa sporeasca increderea in metodele de calcul dezvoltate in cadrul proiectului, raspunzind obiectivelor fundamentale ale programului si prioritatilor formulate de program in directia dezvoltarii metodelor riguroase de analiza teoretica.

**Prezentarea stiintifica a proiectului.** Proiectul urmareste sa abordeze citeva probleme de foarte mare actualitate in cercetare stiintifica internationala din domeniul structurii starii condensate a materiei in limitele unui interval de timp de cca 2 ani. Sistemele statistice multi-componente constituie un exemplu ilustrativ la ora catuala in domeniul comporatrii statistice a sistemelor complexe. Comportarea in vecinatatea punctului critic, rolul interactiei si al dimensionalitatii, natura corelatiilor sint relativ cunoscute in cazul sistemelor statistice uni-componenta, in vreme ce abordarea sistemelor multi-componente este inca in situatia de a analiza foarte multe variante posibile, de a urmari noi piste de cercetare, rezultate atit din informatiile experimentale deosebit de bogate in domeniu, dar si din cerintele intrinseci ale abordarilor teoretice specifice. In cadrul proiectului se va adopta tratarea acestei probleme cu ajutorul tehnicilor speciale de functii de variabila complexa pe sisteme cu dimensiune finita sau cu dimensionalitate redusa dezvoltate recent. Aceasta abordare este noua si originala in domeniu, si este capabila sa ofere informatii relevante, cu caracter de rezultate riguroase. In plus, metoda de abordare in cadrul acestui obiectiv ofera sansa ca in multe cazuri de mare complexitate sa se poata formula conjecturi testabile, ce deschid noi cai de abordare a problematicii si ofera o posibila fundamentare a multor ipoteze rezultate din analiza datelor experimentale. Aceasta abordare se constituie ca una dintre cele mai originale si mai fecunde metode teoretice de a estima rolul razei de actiune a interactiunii in comportarea statistica, rolul aproximatiei clasice a cimpului cristalin, efectul cimpului reactiv Onsager in sisteme multi-componente. Acest obiectiv va fi abordat in principal de cca 3 participanti, folosindu-se in esenta teoria functiilor analitice si a seriilor asimptotice. Agregarea structurilor atomice constituie o problema fundamentala, prin relevanta ei asupra fizico-chimiei moelculelor, a structurilor solide, a fizicii atomice si moleculare si fizicii corpului solid. Noutatea pe care o aduce proiectul in aceasta chestiune este formularea cadrului general al unei abordari teoretice originale bazate pe descrierea quasi-clasica a miscarii electronilor intr-un cimp ionic complex extins pe regiuni spatiale mari. In aceasta directie se urmareste identificarea clara a naturii comportarii semi-clasice a sistemelor de particule in interactune, si se accentueaza rolul hotaritor al statisticii fermionice in asigurarea echilibrului. Originalitatea acestei metode de abordare a structurilor supra-atomice consta in identificarea caracterului relativ "rigid" al energiei de schimb, care se cunoaste ca este un efect pur cuantic, la schimbari locale ale parametrului densitatii electronice. In aceasta consta caracterul de noutate si de originalitate al metodei propuse in raport cu cele doua mari familii de metode utilizate astazi pe scara larga in aceasta problema, metoda functiilor de unda din primele principii si metoda functionalei densitatii. Totodata este de subliniat gradul inalt de complexitate

a problemei, provenit din numarul mare de atomi ce trebuie manipulat, inclusiv gradele lor de libertate electronice. In esenta, metoda, ca urmare a caracterului ei statistic, necesita o abordare specifica unui sistem complex. Asa cum este cunoscut, sistemele de mai multe particule in interactie, incluzind atat gradele de libertate electronice dar si pozitiile ionice, poseda, pe langa starea lor cuantica fundamentala si stari isomere de forma, care sint relativ usor separate in energie, ceea ce face problema identificarii si separarii starilor fundamentale de starile isomerice deosebit de complexa. In plus, complexitatea chestiunii este accentuata de gradul mare de instabilitate frecventa al acestor sisteme, asociat cu punctele de "sa" in functia de potential multi-dimensionala, ce trebuie differentiate de punctele de minim autentic, global sau locale, si de punctele de maxim. In cazul unor situatii complexe, punctele critice sint aproape dens repartizate pe varietati topologice scufundate in spatiul gradelor de libertate, ceea ce creste apreciabil gradul de complexitate a problemei. Abordarea specifica pe care o are in vedere proiectul face uz de calculatoare electronice performante, de softuri de manipulare a datelor statistice, precum si de softuri adaptate si create pentru configurarea hartii critice a functiei de potential multi-dimensionale. Metode suplimentare vor fi folosite pentru testarea, verificarea si asigurarea naturii punctelor de minim in raport cu celelalte puncte critice, printre care, metoda cea mai des folosita este evaluarea vibratiilor atomice. Dupa cum este cunoscut, aceasta metoda implica diagonalizari de matrici, care in cazul de fata au dimensiunea foarte mare, ceea ce creste exponential gradul de dificultate a problemei. Abordarea acestui obiectiv necesita mijloace de calcul foarte performante, si se va desfasura pe durata proiectului de un grup de cca 3 participanti in principal. Tranzitiile feromagnetice de tip Ising constituie un subiect clasic al starii condensate a materiei. Recent, acest subiect cunoaste o puternica revitalizare ca urmare a constatarii ca aceste modele pot simula miscari moleculare in structuri moleculare complexe cum sint structurile proteinice. In plus, caracteristici cu totul noi au fost identificate, si sint in curs de identificare, in cea ce priveste comportarea critica a acestor modele in prezenta interactiunilor multi-particula. Interactiunile multi-particula sint in general provenite din interactiuni efective, adica interactiuni fundamentale bi-particula modificate de miscarea complexa a purtatorilor materiali, ai surselor de interactie. In cazul sistemelor complexe, atat moleculare cit si nucleare, sint frecvente cazurile in care dinamica, in special cea cu constringeri cinematice, a componentilor materiali conduce la interactiuni multi-particula. Efectele acestor interactiuni sint prea putin studiate la ora actuala, desi exista indicii clare ca ele ar putea fi originea unor particularitati cu totul noi, ce sint incluse acum in categoria generala a corelatiilor. In cadrul acestui obiectiv se vor studia efectele interactiunilor tri-particula asupra tranzitiilor feromagnetice de tip Ising pe retele de tipul 3-12, urmarindu-se in principal comparatia cu modelul Ising pe retele honey-comb. Se va accentua determinarea conditiilor de aparitie a tranzitiilor feromagnetice pentru modelul Ising pe reseaua 3-12 in functie de intensitatea interactiei de trei corpuri si se va calcula magnetizarea spontana si functia de corelatie spin-spin. Aceste abordari teoretice implica atat studiul analitic al sumei de stare statistice si a marimilor termodinamice asociate, cit si rezolvarea numerica a ecuatiilor neliniare obtinute in urma formularii acestor solutii. Problema pe care o abordeaza proiectul este deosebit de originala, sub raportul investigarii efectului interactiunilor efective de trei corpuri, si de asemenea complexa dat fiind structura topologica speciala a sistemului laticial. Obiectivul va fi abordat de cca 2 participanti in particular. Energia de legatura a atomilor grei necesita rafinarea metodelor de descriere quasi-clasica in vederea includerii corectiilor de tip cuantic. In particular, rezultatele trebuie comparate cu cele referitoare la metoda seriilor asimptotice, care trebuie reproduse in conditiile particulare specifice acestei formulari a problemei, pentru ca sa poata fi facuta comparatia. Ca urmare, aceasta chestiune este de un grad inalt de complexitate tehnica, si necesita multa abilitate computationala, ca si o buna cunoastere a seriilor asimptotice. In plus, comparatia se va face cu calculele clasice ale lui Schwinger, in care se propun atat o tratare perturbativa a partii ecranate a potentialului coulombian cit si o tratare variationala a contributiei sistemului de electroni in interactie. Este de subliniat ca se va

face abordarea perturbativa de tip Hartree la partea cuantica a interactiei, neinclusa in abordarea quasi-clasica, si, in plus se vor stima corectii cuantice ale energiei de schimb sub forma perturbativa. In acest context, se va face uz de asa-numita proprietate de "rigiditate" a energiei de schimb, proprietate care atunci cind este neglijata genereaza instabilitati, comportari nefizice, si divergente in schemele iterative de calcul. Se va face legatura cu metoda Slater a domeniului de corelatie a interactiei de schimb, si se va compara la fiecare pas rezultatele obtinute in cadrul celor doua metode. Abordarea prezentata este deosebit de complexa si de un mare grad de originalitate, intrucit problema energiei de legatura a atomilor grei este de mult timp blocata de asa-numita aproximatie semi-clasica. Conform acestei aproximatii, rezultatul este corect in limita nefizica a sarcinilor infinite cind electronii colapseaza pe nucleu, si atomul este "clasic". In acest context este usor de inteles teorema "no-binding", zona spatiala intermediara fiind considerata extrem de dificil de abordat la momentul actual, ca urmare a absentei unor metode adecvate. Descrierea quasi-clasica ofera una dintre aceste metode si, pe langa legatura atomica, ea furnizeaza si cadrul general al schemei concrete de calcul al legaturii chimice. Acest obiectiv va fi abordat in principal de cca 2 participanti, folosindu-se metode si mijloace de calcul performante.

Obiectivele proiectului sînd deosebit de **relevante** pentru domeniul starii condensate a materiei, si, in general, al fizicii statistice si fizicii particulelor in interactie. Sistemele multi-componente sînt in atentie tuturor cercetatorilor principali din aceste domenii la ora actuala, si metodele originale de analiza a problemei pe care le aduce proiectul vor permite tratarea intr-o maniera originala a unor probleme de mare interes in aceasta directie. Rolul razei de actiune a interactiei in comportarea critica a sistemelor statistice complexe, precum cele multi-componente, este de mare actualitate si importanta intrucit acest element va contribui la diferentierea dintre modele matematice, chiar exact si riguros solubile, si modele fizice realiste, relevante pentru situatii experimentale bine determinate, chiar daca tratarea lor matematica este aproximativa sub raport numeric. Evaluarea aproximatiilor este in acest context de maxima importanta. Sub acest raport, proiectul corespunde politicii nationale in cercetarea fundamentala de a asigura baza de cunostinte sigure, verificabile, solide pentru adincirea problemelor de baza din fizica moderna. Interactia de trei particule in modelul Ising este printre primele incercari de acest gen, si aplicarea ei la o retea particulara permite dobindirea de cunostinte precise, ce pot constitui puncte de referinta pentru cercetarile ulterioare in acest domeniu. Din acest punct de vedere, acest obiectiv al proiectului prezinta un deosebit interes. Descrierea quasi-clasica dezvoltata recent furnizeaza o serie de metode si rezultate ce isi gasesc aplicarea in structuri nanofazice, supra-moleculare si clusteri atomici cu constrangeri geometrice (de exemplu, depusi pe suprafete). Ca urmare, este profitabila utilizarea acestor metode noi intr-un domeniu de mare interes la ora actuala cum este cel al nanostructurilor. Aceasta metoda permite obtinerea unui volum mare de rezultate intr-un timp relativ scurt in comparatie cu alte metode, datorita gradului ei inalt de eficienta, iar optimizarea soft-urilor componente schemei de calcul permite ridicarea acestui grad intr-o proportie apreciabila. Este de subliniat ca, pe plan mai larg, problema legaturii chimice se afla astazi intr-un relativ blocaj cauzat de volumul mare de calcul necesar si de relativa ineficienta a algoritmilor folositi. Optimizarea acestor algoritmi si implementarea calculelor pe scheme de calcul de mare performanta constituie un obiectiv major al cercetarii stiintifice in domeniu pe plan international. Metoda pe care o propune prezentul proiect abordeaza chestiunea intr-un mod mai eficient, prin identificarea clara si self-consistenta a contributiilor clasice (sau quasi-clasice) de cele cuantice, ceea ce explica eficienta metodei si ii furnizeaza gradul de profitabilitate ridicat. Dobindirea de cunostinte fundamentale noi in acest domeniu de mare interes practic la momentul actual corespunde politicii stiintifice nationale in cercetarea stiintifica si prioritatilor planului national de cercetare in acest domeniu.

Realizarea proiectului se fa desfasura conform **schemei** obiectivelor majore: 1. Proprietati critice

in sisteme de faze multi-componente 2. Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari 3. Feromagnetism laticial cu interactie de trei corpuri 4. Scheme de calcul aproximativ pentru energia de legatura a atomilor grei Participantii 2,4,7 vor fi afectati primului obiectiv in perioada 1 si perioada 2; participantii 5 si 9 vor aborda obiectivul 3 in perioada 3 si 4; participantii 1,3,6,8 se vor ocupa de obiectivele 2 si 3 in perioadele 2 si 4.

**Rezultatele** estimate sint urmatoarele: 1. Stabilirea rolului razei de interactie in comportarea critica a sistemelor multi-componente 2. Stabilirea validitatii aproximatiei cimpului cristalin si a cimpului reactiv in aceleasi sisteme 3. Diagrama de faza a tranzitiei feromagnetice in sisteme Ising cu interactie tri-particula pe retea 3-12 in functie de intensitatea interactiei 4. Calculul magnetizarii spontane si a functiilor de corelatie in acelasi sistem 5. Calculul energiei de legatura in clusteri supra-atomici de metale simple in aproximatia ionilor punctiformi 6. Stabilirea formelor geometrice ale starii fundamentale si ale isomerilor de forma in aceleasi sisteme 7. Calculul energiei de legatura a atomilor grei in aproximatia cauzi-clasiac 8. Calculul corectiilor cuantice de tip Hartree si de tip energie de schimb in atomii grei. Rezultatele vor fi redactate sub forma a unui total de 4 articole stiintifice publicabile in revistele de specialitate. Se va urmari participarea la conferintele si manifestarile stiintifice de specialitate internationale pentru care se vor pregati 4 comunicari stiintifice.

**Impact.** Rezultatele stiintifice de aceasta natura, fundamentale si riguroase, conforme cu tendintele si interesul actual in domeniul de cercetare al starii condensate a materiei, fizicii statistice si teoriilor de mai multe corpuri in interactie contribuie la cresterea economica generala prin ridicarea gradului de sensibilizare si de constientizare a opiniei publice fata de problemele de natura stiintifica; contribuie la imbunatatirea climatului social, la stoparea degradarii si eroziunii lui intelectuale, prin perfectionarea, antrenarea si cresterea calificarii cercetarilor implicati in acest proiect; prin antrenarea a 2 tineri cercetatori noi in acest proiect la cresterea locurilor de munca si imbunatatire a conditiilor de viata. Rezultatele obtinute in cadrul acestui proiect vor fi transferate invatamintului prin formele de pregatire post-graduate, doctorale si post-doctorale.

**Conducerea.** Desfasurarea cercetarilor in cadrul acestui proiect este planificata si coordonata de catre conducatorul de proiect, care va organiza periodic (saptaminal) intruniri de lucru pentru analiza stadiului desfasurarii operatiunilor de cercetare. Comunicarea intre participantii se va realiza in permanenta prin retea locala electronica. Responsabilii de obiective si de faze vor prezenta periodic dari de seama privind mersul operatiunilor de cercetare, pentru a monitoriza la timp, in termen si in bune conditii derularea intregii activitati. Se va asigura prin aceleasi metode transferul de informatii de la un obiectiv la altul, pentru colectivizarea rezultatelor si sinergizarea activitatilor de cercetare. Caracterul multidisciplinar se va asigura prin contacte cu personalitati din alte domenii care vor fi informate, si carora li se va cere opinia, periodic despre desfasurarea proiectului. Se va urmari diseminarea informatiilor stiintifice de larg interes catre marele public, in vederea ridicarii gradului de comunicare sociala in probleme de natura stiintifica. Actiunile suport in vederea desfasurarii proiectului vor avea in vedere participari la conferinte, manifestari stiintifice, stagii de lucru, actiuni de documentare si implementare a tehnicii superioare de calcul si comunicare electronica.