
The Antiphysical Review

Founded and Edited by M. Apostol

49 (2001)

ISSN 1453-4436

Cercetari teoretice fundamentale asupra unor probleme actuale de materie condensata

M. Apostol

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

Obiectivele stiintifice ale proiectului:

1. Proprietati critice in sisteme de faze multi-componente
2. Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari
3. Ferromagnetism lacial cu interactie de trei corpuri
4. Scheme de calcul aproximativ pentru energia de legatura a atomilor grei

In sistemele de faze multicomponente se urmaresti 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 diferențele 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 comporatrii statistice a acestor sisteme complexe.

Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari se va studia pe baza extinderii descrierii quasi-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 linga aplicatiile lor la sisteme moleculare complexe, precum proteinelor, sistemele feromagnetic cu interactii multi-particula constituie totodata teste pentru metodele fizico-matematice specifice. Posibile tranzitii de faza feromagnetic 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.

DESCRIEREA PROIECTULUI

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 sunt 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, sunt 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 ami 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, sunt tratabile cu astfel de metode. In plus, testarea unor modele exact solubile, sau comparatia rezulattelor cu cele referitoare la sisteme exact solubile simlare, constituie o directie de cercetare importanta pentru estimarea gradului de utilizare al acestor metode.

In domeniul agregarii atomice s-au evideniat 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-consistenta 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 rezulatte urmeaza a fi extinse, testate in privinta stabiliattii structurilor egoemtrice prezise 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 mult ceentre internationale, precum Leuwen-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 Strommungsforschung Gottingen a fost analizat teoretic, si i s-a determinat structura, de catre participanti 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.

In prima perioada a desfasurarii proiectului (sfirsitul anului 2001 si prima jumatate a anului 2002) se va urmari 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 diferența in comportarea proprietatilor statistice adusa de interactiile de raza lunga de actiune in raport cu interactiile de raza scurta de actiune. Este evident ca acest aspect contribuie esential la relevanta rezulattelor 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 so-

lutionarui 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 atit respingerea electron-electron, respingerea ion-ion cit si atractia electron-ion, urmarindu-se posibilitatea echilibrului, si in general, a legaturii atomice. Este bine-cunoscuta 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, atit in stare fundamentala cit si isomerii de forma corespunzatori, si se vor analiza regularitatatile 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 principiale 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 prioritар pe scara internationala, acela al clusterilor si nanostructurilor.

In partea a treia a desfasurarii proiectului (prima jumata 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 atit pentru proprietatile statistice ale macromoleculelor, 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 feromagnetic. Se va clarifica rolul curbelor 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 dimensionalității 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

atit 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-consistenta rezultatelor, separabilitatea functiei de unda in functii de unda uniparticula, etc. Totodata, rezultatele aproximative bazate pe metoda Thomas-Fermi, necesita evaluarea ueni seri asimptotice, ceea ce ridică, pe lîngă dificultățile inerente de calcul direct, probleme legate de convergență, de eroare, și 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 potențialelor de ioizare, etc). Interesul pentru acest tip de problema decurge din cercetarii astrofizice recente, dar și din studii moleculare și 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 dezvoltată recent pentru clusteri atomici și sisteme atomice moleculare și supramoleculare, este aplicabilă atomilor grei, în anumite limite. Studiul acestor limite, și investigarea concreta a rezultatelor ce se pot obține cu această metodă în cazul atomilor grei constituie obiectivul de interes major în acest context. Se va calcula energia de legatura atomică în aproximarea quasi-clasica inclusiv corectii cuantice derivate în descrierea quasi-clasica, și se vor compara rezultatele cu cele obținute prin metoda seriilor asimptotice. Se va clarifica natura exactă a aproximatiei semi-classice în acest caz și implicațiile ei asupra teoremei "no-binding", stabilindu-se în acest fel o consonanță cu obiectivul numărul 2 al prezentului proiect. Coroborarea rezultatelor în aceste cazuri este de natură să sporească increderea în metodele de calcul dezvoltate în cadrul proiectului, răspunzând obiectivelor fundamentale ale programului și priorităților formulate de program în direcția dezvoltării metodelor riguroase de analiză teoretică.

Proiectul urmărește să abordeze cîteva probleme de foarte mare actualitate în cercetare științifică internațională din domeniul structurii stării condensate a materiei în limitele unui interval de timp de cca 2 ani.

Sistemele statistice multi-componente constituie un exemplu ilustrativ la ora catuală în domeniul comparării statistică a sistemelor complexe. Comportarea în vecinătatea punctului critic, rolul interacției și a dimensionalității, natura corelațiilor sunt relativ cunoscute în cazul sistemelor statistică uni-componentă, în vreme ce abordarea sistemelor multi-componente este încă în situația de a analiza foarte multe variante posibile, de a urmări noi piste de cercetare, rezultate atât din informații experimentale deosebit de bogate în domeniu, dar și din cerințele înținse ale abordărilor teoretice specifice. În cadrul proiectului se va adopta tratarea acestei probleme cu ajutorul tehnicilor speciale de funcții de variabilă complexă pe sisteme cu dimensiune finită sau cu dimensionalitate redusă dezvoltate recent. Aceasta abordare este nouă și originală în domeniu, și este capabilă să ofere informații relevante, cu caracter de rezultat riguroase. În plus, metoda de abordare în cadrul acestui obiectiv oferă sansă ca în multe cazuri de mare complexitate să se poată formula conjecturi testabile, ce deschid noi cai de abordare a problematicii și oferă o posibilă fundamentare a multor ipoteze rezultate din analiza datelor experimentale. Aceasta abordare se constituie ca una dintre cele mai originale și mai fecunde metode teoretice de a estima rolul razei de acțiune a interacțiunii în comportarea statistică, rul approximatiei clasice acimpului cristalin, efectul cipului reactiv Onsager în sisteme multi-componente. Acest obiectiv va fi abordat în principal de cca 3 participanți, folosindu-se în esență teoria funcțiilor analitice și a seriilor asimptotice.

Agregarea structurilor atomice constituie o problema fundamentală, prin relevanta ei asupra fizico-

chimiei moleculelor, a structurilor solide, a fizicii atomice si moleculare si fizicii corpului solid. Noutatea pe care o aduce proiectul i 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 comporatrii semi-clasice asistemelor de particule in interactiune, 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 libetate 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 atit gradele de libertate electronice dar si pozitiile ionice, poseda, pe linga starea lor cuantica fundamentala si stari isomere de forma, care sunt relativ usor separate in energie, ceea ce face problema identificarii si separarii starilor fundamentale de starile isomerice deosebit de complexa. In plus, complexitatea chestiuni este accentuata de gradul mare de instabilitate frecventa al acestor sisteme, asociat cu punctele de "sa" in functia de potential multi-dimensionalala, ce trebuie diferențiate de punctele de minim autentic, global sau locale, si de punctele de maxim. In cazul unor situatii complexe, punctele critice sunt 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 participantii in principal.

Tranzitiile feromagnetice de tip Ising constituie un subiect clasic al starii condensate a materie. Recent, acest subiect cunoaste o puternica revitalizare ca urmare a constatarii ca aceste modele pot simula miscari moleculare in structuri moleculare complexe cum sunt structurile proteinice. In plus, caracteristici cu totul noi au fost identificate, si sunt in curs de identificare, in cea ce priveste comporarea critica a acestor modele in prezenta interactiunilor multi-particula. Interactiunile multi-particula sunt 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, atit moleculele cit si nucleare, sunt frecvente cazurile in care dinamica, in special cea cu constringeri cinematici, a componentilor materiali conduce la interactiuni multi-particula. Efectele acestor interactiuni sunt prea putin studiate la ora actuala, desi exista indicii clare ca ele ar putea fi originea unor particularitati cu totul noi, ce sunt incluse acum in categoria generala a corelatiilor. In acrul acestui obiectiv se vor studia efectele interactiunilor tri-particula asuora transzitiilor efomagnetice 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 reteaua 3-12 in functie de intensitatea interactiei de trei corperi si se va calcula magnetizarea spontana si functia de corelatie spin-spin.

Aceste abordari teoretice implica atit 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 interactiilor efective de trei corpuri, si de asemenea complexa dat fiind structura topologica speciala a sistemului lational. 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 atit o tratare perturbativa a aprietii 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 intedes 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 linga 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 sunt deosebit de relevante pentru domeniul starii condensate a materiei, si, in general, al fizicii statistice si fizicii particulelor in interactie. Sistemele multi-componente sunt in atentia 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 diferenierea dintre modele matematice, chiar exact si riguros solubile, si modele fizice eraliste, relevante pentru situatii experimentale bine determinate, chiar adca tratarea lor matematica este aproxiamtiva sub raportul numeric. Evaluarea aproxiamtilor este in acest context de maxima importanta. Sub acest raport, proiectul corespunde politicii nationale in cercetarea fundamentala e 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 onstitui puncte de referinta pentru ceretarile 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-molecularare si clusteri atomici cu constringeri geomtrice

(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 legaturi 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 domeniul 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 face desfasura conform schemei obiectivelor majore:

1. Proprietati critice in sisteme de faze multi-componente
2. Agregarea clusterilor atomici, moleculari si supramoleculari
3. Ferromagnetism latical 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 sunt 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 intercatie tri-particula pe retaua 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 causi-clasica
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.

Rezultatele stiintifice de aceasta natura, fundamentale si riguroase, conforme cu tendintele si interesul actual in domeniul de cercetare al starii condensatae a materiei, fizicii statistice si teoriilor de mai multe corpuri in interactie contribuie la cresterea economica generala prin ridicarea gradului de sensibilizare si de conştientizare 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 implicați în acest proiect; prin antrenarea a 2 tineri cercetatori noi în acest proiect la creșterea locurilor de munca și îmbunătățire a condițiilor de viață. Rezultatele obținute în cadrul acestui proiect vor fi transferate invatamântului prin formele de pregătire post-graduate, doctorale și post-doctorale.

Desfasurarea cercetarilor în cadrul acestui proiect este planificată și coordonată de către conducerul de proiect, care va organiza periodic (saptaminal) întrevederi de lucru pentru analiza stadiului desfasurării operațiunilor de cercetare. Comunicarea între participanți se va realiza în permanenta prin rețeaua locală electronică. Responsabilității de obiective și de faze vor prezenta periodic din de seamă privind mersul operațiunilor de cercetare, pentru a monitoriza la timp, în termen și în bune condiții derularea integrității activității. Se va asigura prin aceleși metode transferul de informații de la un obiectiv la altul, pentru colectivizarea rezultatelor și sinergizarea activităților de cercetare. Caracterul multidisciplinar se va asigura prin contacte cu personaliști din alte domenii care vor fi informate, și cărora li se va cere opinia, periodic despre desfasurarea proiectului. Se va urmări diseminarea informațiilor științifice de larg interes către public, în vederea ridicării gradului de comunicare socială în problemele naturii științifice.

Actiunile suport în vederea desfasurării proiectului vor avea în vedere participarea la conferințe, manifestări științifice, stagii de lucru, actiuni de documentare și implementare a tehnicii superioare de calcul și comunicare electronică.