

Advanced quantum and statistical methods for mesoscopic systems, with applications in the construction of ultra-sensitive devices

TITLUL PROIECTULUI: Advanced quantum and statistical methods for mesoscopic systems, with applications in the construction of ultra-sensitive devices

Cod Proiect: PN-II-ID-PCE-2011-3-0960

Director proiect: Dragoş-Victor Anghel

Etapa V: ianuarie-noiembrie, 2015

Autori: S. Cojocaru, G. A. Nemnes si D. V. Anghel

1 Rezumatul fazei

1.1 Interactiunea electron-fonon in sisteme nanoscopice

A fost studiată interacția electronilor cu fononii în filmele metalice subțiri (de ordinul a 10 nm grosime), ca cele utilizate în structurile nano-dispozitivelor moderne de detectie a radiațiilor și de răcire electronică. Experimental s-a constatat o schimbare calitativă a proprietăților termice ale acestor structuri când sunt răcite sub o anumită temperatură critică T^* , iar noi încercăm să explicăm teoretic acest comportament. T^* depinde de materialele folosite și de dimensiunile sistemului, dar în general este de câteva sute de mK (sub 0.5 K).

Întelegerea proprietăților termice ale sistemului este importantă deoarece acestea determină performanțele dispozitivelor prin stabilirea parametrilor de lucru și a nivelului de zgomot. Pentru modelare am luat în considerare două cazuri. În *cazul 1* filmul, în general de Cu, este depus pe un suport izolator, cum ar fi nitrura de siliciu SiN_x , iar în *cazul 2* filmul nu are niciun suport, ci este susținut doar pe margini de materialul masiv (bulk). În ambele cazuri modurile fononice sunt unde elastice de tip Lamb, iar cuantizarea vectorilor de undă în direcție perpendiculară pe suprafața structurii duce la o tranziție (continua) de la un gaz fononic 3-dimensional (3D) la un gaz fononic 2-dimensional (2D) odată cu scăderea temperaturii. Temperatura în jurul căreia se realizează această tranziție este corelată cu temperatura critică experimentală T^* .

În această primă etapă ne-am concentrat pe domeniul de temperaturi joase, sub T^* , în care lungimile de undă ale fononilor sunt semnificativ mai mari decât grosimea sistemului film plus substrat. În aceste condiții am putut folosi aproximații analitice ale relațiilor de dispersie (mergând până la ordinul 5 în anumite dezvoltări Taylor) și am obținut dependența de temperatură a fluxului de căldură între sistemul de electroni și rețeaua cristalină ca fiind proporțional cu $T_e^x - T_{ph}^x$, unde prin T_e am notat temperatura sistemului de electroni, iar prin T_{ph} am notat temperatura sistemului de fononi. Exponentul x al temperaturii T ia diverse valori în funcție de modurile fononice luate în considerare în calculul schimbului de căldură și de modul de descriere al sistemului de electroni. Astfel, în cazul când electronii din stratul metalic păstrează proprietățile lichidului Fermi tridimensional ale materialului masiv, fluxul de energie între electroni și fononi este diferit de cazul când se realizează starea electronică

confinata de tip groapa cuantica (quantum well). Pentru lichidul Fermi $3D$, in contrast cu starea Quantum Well, interactia cu cele doua tipuri de unde elastice Lamb (dilatationale si de flexiune) da contributi comparabile la puterea de disipare a energiei – un rezultat netrivial, tinand cont de caracterul calitativ diferit al vibratiilor respective (e.g., dispersie acustica liniara si neliniara). In acest caz fluxul de caldura este proportional cu $T_e^4 - T_{ph}^4$.

In cazul unui sistem de electroni de tip groapa cuantica, in limita temperaturilor joase modurile Lamb flexurale dau o contributie mai mare la schimbul de caldura, iar dependenta de temperatura a acestuia este proportionala cu $T_e^{3.5} - T_{ph}^{3.5}$. In acest caz insa observam un fenomen interesant in sensul ca pentru anumite grosimi ale stratului metalic fluxul de caldura creste brusc cu mai mult de un ordin de marime, ca apoi sa scada la fel de brusc, formand niste creste ascutite atunci cand este plotat ca functie de d si T_e (d este grosimea stratului metalic). Acest comportament ar putea permite ajustarea dramatica a proprietatilor termice ale sistemului prin modificari fine ale grosimii stratului metalic, sau determinarea grosimii ori a contaminarii suprafetei stratului metalic prin masuratori de transport de caldura.

1.2 Sisteme cu doua nivele in dispozitive optoelectronice

In cadrul sistemelor cu doua nivele este descris un dispozitiv nanoscopic care utilizeaza proprietatile moleculelor fotocromice din clasa *fulgide*. Cele doua conformatii moleculare posibile se pot interchimba prin iluminare cu lungimi de unda diferite, corespunzatoare spectrului vizibil si ultraviolet. Contactata prin intermediul electrozilor nanoscopici, molecula *fulgide* devine elementul activ al dispozitivului, transferul de sarcina fiind puternic dependent de configuratie – inel deschis/inchis. Folosind calcule de tip DFT este calculat raportul curentilor in starile ON/OFF ale dispozitivului. Acesta poate avea aplicatii atat in detectia radiatiei electromagnetice, cat si ca dispozitiv electro-optic de stocare.

1.3 Descrierea sistemelor de particule in interactie ca gaze ideale cu statistica fractionara – aplicatie la teoria BCS

Am stabilit in urma cu cativa ani [1, 2, 3] ca statistica fractionara reprezinta un formalism general de descriere a sistemelor de particule cu interactie ca gaze ideale cu proprietati statistice speciale. In aceasta faza am extins formalismul la modelul BCS de supraconductor. Pentru aceasta am definit energia efectiva a unui supraconductor, $E_{eff}(T)$, ca fiind diferenta dintre energia supraconductorului la temperatura T si energia acestuia la temperatura $T = 0$ K. Mai departe, E_{eff} a fost definita ca fiind suma dintre energia condensatului \mathcal{E}_c si energia quasiparticulelor E_{qp} . Deoarece atat energia condensatului, cat si energiile de cuasiparticule depind de energia de gap Δ , care la randul ei depinde de populatiile starilor de cuasiparticule, sistemul se comporta ca un lichid Fermi. Energia de cuasiparticula BCS este chiar energia cuasiparticulelor Landau ale acestui lichid Fermi.

Aratam ca energiile de cuasiparticula se pot defini intr-o infinitate de moduri si alegem o definitie in care E_{eff} este chiar suma energiilor de cuasiparticula (fara termeni suplimentari, cum ar fi energia condensatului). In aceasta descriere lichidul Fermi supraconductor se transforma intr-un gaz ideal cu energii de cuasiparticula care au un gap de energie egal cu Δ (dupa cum am spus, se puteau face si alte alegeri). Calculam parametrii statisticii fractionare pentru acest lichid si aratam ca este echivalent termodinamic cu descrierea tipica BCS.

In final adaugam o interactie intre cuasiparticulele BCS si aratam ca aceasta stabilizeaza condensatul, crescand temperatura critica. Energia de gap, si in cazul acesta, depinde de alegerea energiilor de cuasiparticula.

Mai avem de facut cateva retusuri. Lucrarea este aproape gata si urmeaza sa fie trimisa in curand la publicat.

1.4 Termalizarea sistemelor dezordonate cu interactie modelata prin statistica de excluziune fractionara

Sisteme de particule in interactie situate in medii cu dezordine structurala, cu proprietati vit-roase, sunt analizate din perspectiva statisticii fractionare. Formalismul dezvoltat permite o descriere unitara a sistemelor de tip *Fermi*, *Coulomb*, *Bose glass* cat si o generalizare a acestora, denumita generic *FES glass (FESG)*. Pentru descrierea proceselor de relaxare de ne-echilibru sunt utilizate ratele de tranzitie dezvoltate anterior. Evolutia in timp a domeniilor, ce caracterizeaza densitatea de particule in raport cu cea de echilibru, este descrisa prin intermediul functiilor de corelatie spatiala si autocorelatie. Astfel, se pune in evidenta relaxarea lenta a sistemelor cu interactie in comparatie cu sistemul dezordonat fara interactie si cu cel ordonat.

1.5 Metode teoretice noi pentru studierea statisticii cuantice a fononilor in nanostructuri

Este prezentata o metoda analitica pentru investigarea efectului conditiilor la limita asupra oscilatiilor retelei cristaline in nanostructuri, in special al lantului atomic. Cu ajutorul acestei metode sunt obtinute expresiile analitice pentru energiile si functiile proprii ale sistemului de oscilatori ca functie de constantele de cuplaj la capetele lantului. Pe aceasta baza este obtinuta descrierea statisticii cuantice a fononilor si sunt obtinute expresii analitice pentru functiile termodinamice ale sistemului studiat. Este demonstrata evolutia starilor cuantice de la limita lantului liber la cea a lantului cu capetele fixe. Este scos in evidenta fenomenul transformarii miscarii translationale a centrului de masa in miscarea oscilatorie prin intermediul unui crossover dupa marimea constantelor de cuplaj. Starea corespunzatoare centrului de masa este identificata ca cea mai joasa dupa energie si deci contribuind semnificativ la termodinamica statistica a sistemului nanoscopic. Un alt rezultat important este demonstrarea ne-echidistantei spectrului de excitatii in nanostructuri, adica a neomogenitatii distributiei starilor fononice in special in zona energiilor joase. Este descrisa o manifestare reprezentativa pentru aceste proprietati deosebite si care ar putea fi observata experimental urmarind dependenta de temperatura a caldurii specifice $C(T)$ in nanofire prin observarea devierii aparente de la legea Nernst, cand valoarea extrapolata $C(T \rightarrow 0)$ apare ca fiind diferita de zero.

1.6 Articole si prezentari legate de aceasta faza

Articole in reviste indexate, sau cotate ISI:

1. D. V. Anghel and S. Cojocaru, "Electron-phonon heat exchange in layered nano-systems", *Solid State Communications* **227** 56 (2016) (arXiv1508.05184).
2. S. Cojocaru and D. V. Anghel, "Heat transfer in metal films due to coupling of hot electrons to Lamb phonons," submitted to *Phys. Rev. B* (decision pending).
3. G. A. Nemnes and C. Visan, "Electron transport properties of fulgide-based photochromic switches", *RSC Advances* **5**, 26438 (2015).
4. G. A. Nemnes and C. Visan, "Ab initio vibrational and thermal properties of carbon allotropes: polycyclic and rectangular networks", *Comp. Mat. Sci.* **109**, 14 (2015).
5. G. A. Nemnes and D. V. Anghel, "Glassy Behavior of Disordered Fractional Exclusion Statistics Systems", *Rom. J. Phys.* **60**, 691 (2015).
6. A. E. Stanciu, "Thermoelectric effects in nanostructured quantum wires in the non-linear temperature regime", G. A. Nemnes, and A. Manolescu, *Rom. J. Phys.* **60**, 716 (2015).

7. A. A. Nilă, G. A. Nemnes, and A. Manolescu, "Ab initio investigation of optical properties in triangular graphene - boron nitride core-shell nanostructures", Rom. J. Phys. **60**, 697 (2015).
8. D. V. Anghel, "The stumbling block of the Gibbs entropy: the reality of the negative absolute temperatures," to appear in EPJ Web of Conferences (arXiv1509.08020).
9. S. Cojocaru and D. V. Anghel, "Transfer of Heat Between Electrons and Phonons in Metallic Nanostructures", International Federation for Medical and Biological Engineering Proceedings Series **55**, 21 (2015), ISBN: 978-981-287-735-2 (Print) 978-981-287-736-9 (Online).

1.7 Prezentari la conferinte

Numele persoanei care a facut prezentarea este evidentiat.

1. **S. Cojocaru**, prezentare orala invitata la conferinta "The 3rd International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering (ICNBME-2015)," September 23-26, 2015, Chisinau, Moldova
2. **S. Cojocaru**, *A generalization of the Bloch law for the temperature dependent magnetization of ferromagnetic nanoparticles*, prezentare orala invitata la conferinta "Advances in Nanophysics and Nanophotonics," 31.08-2.09.2015, Magurele, Romania.
<http://www.infim.ro/nanophysics-solar/>
3. **D. V. Anghel** and G. A. Nemnes, *The BCS theory in the fractional exclusion statistics formalism*, prezentare orala invitata la conferinta "Frontiers of Quantum and Mesoscopic Thermodynamics," 27 July - 1 August 2015, Prague, Czech Republic
<http://fqmt.fzu.cz/15/index.php?active=table&chair=1>
4. **D. V. Anghel** and S. Cojocaru, *Electron-phonon heat exchange in the layered structure of nanodetectors*, prezentare orala invitata la conferinta "Advances in Nanophysics and Nanophotonics," 31.08-2.09.2015, Magurele, Romania.
<http://www.infim.ro/nanophysics-solar/>
5. **G. A. Nemnes** and C. Visan, *Ab initio investigations of spin transport and thermoelectric effects in graphene - boron nitride nanoribbons*, prezentare orala la conferinta "Mathematical Modeling and Computational Physics 2015," 13-17.07.2015, Stara Lesna, Slovacia
<http://web.tuke.sk/mmcp/mmcp2015/>.
6. **D. V. Anghel**, *Gibbs vs Boltzmann statistics and the controversy about negative temperatures*, prezentare orala la conferinta "Mathematical Modeling and Computational Physics 2015," 13-17.07.2015, Stara Lesna, Slovacia
<http://web.tuke.sk/mmcp/mmcp2015/>.

1.8 Alte activitati legate de proiect

- D. V. Anghel a fost unul din directorii conferintei internationale *Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems*, care s-a desfasurat in perioada 1 – 5 septembrie 2014 la Brasov, Romania si este unul din editorii lucrarilor acestei conferinte, aparute in Rom. J. Phys. vol. 60, numerele 5-6, 2015 (http://www.nipne.ro/rjp/2015_60_5-6.html).

2 Interactiunea electron-fonon in sisteme nanoscopice

Deosebirea fundamentala intre materialele masive si nanomateriale este determinata de rolul important pe care il au conditiile de pe suprafata sau la interfata cu alte elemente structurale. Schimbarea calitativa a situatiei nu se datoreaza doar cresterii raportului suprafata-volum sau dependentei de geometria obiectului studiat: confinarea duce la imposibilitatea neglijarii efectelor cuantice la scala nano- sau microscopica. Sunt modificate atat spectrele de excitatii, cat si amplitudinile sau functiile de unda ale acestora. In acest context un rol deosebit le revine excitatiilor de tip colectiv, cum sunt fononii si magnonii. Pe de o parte, prin natura, lor excitatiile colective implica un numar mare de atomi, sunt puternic delocalizate si pastreaza coerenta la distante mari. Aceasta, la randul sau, face ca modurile respective sa fie influentate de starile de pe intreaga suprafata a "materialului". In abordarile teoretice, ca regula, se presupune ca starile de pe suprafata sunt sau cele libere sau cele fixe - o simplificare, care asigura uniformitatea distributiei spectrului de excitatii si trecerea directa la descrierea continua. Pe de alta parte, excitatiile colective sunt dominante in zona energiilor joase ale spectrului si astfel joaca un rol important in termodinamica statistica.

Pe parcursul acestei faze am abordat mai multe aspecte ale problemei excitatiilor colective (in special fononi) in nanostructuri (nanofire, straturi metalice, membrane dielectrice, nanoparticule) din perspectiva descrierii analitice a modelelor pertinente, urmarind stabilirea relatiei parametrilor microscopici cu proprietatile observabile. Aceasta relatie se dovedeste a fi esentiala pentru interpretarea datelor experimentale. Astfel, descrierea analitica propusa de noi pentru magnetizarea spontana a nanoparticulelor feromagnetice [4] are forma diferita de cea fenomenologica [5] utilizata in mod curent, e.g. [6, 7], si da o interpretare noua a datelor experimentale. Metoda propusa pentru descrierea comportamentului fononilor in dependenta de conditiile de suprafata a relevat unele proprietati noi ale statisticii cuantice a fononilor in nanostructuri, in special "cuplajul" intre gradele interne de libertate (oscilatiile retelei cristaline) si miscarea centrului de masa a sistemului, care este de obicei neglijata, insa care modifica substantial excitatiile de energie joasa. Un alt domeniu intens explorat si din perspectiva aplicatiilor il reprezinta starile de neechilibru si transferul de caldura in nanostructuri, in special cel intermediat de interactia electron-fonon in microracitoarele electronice. Ideea micro-racitorului electronic propusa in [8] este intens dezvoltata in vederea diverselor aplicatii, cum ar fi detectori ultra-sensibili de particule si radiatii intr-un diapazon larg de energii, de la cel nuclear la cel astronomic [9, 10], sau racirea directa "on chip" a dispozitivelor microscopice, e.g. a qubitilor. Performanta record atinsa recent [11] a demonstrat posibilitatea racirii unui element micrometric de la 150 mK pana la temperatura de 30 mK. Factorul principal care limiteaza atingerea unor performante mai mari este interactia cu fononii si transferul de caldura intre electroni si fononi.

2.1 Disiparea caldurii prin intermediul interactiei electron-fonon in filme metalice subtiri la temperaturi joase.

Interactia electronilor cu oscilatiile retelei cristaline (EPI) in nanodispozitive este un domeniu de cercetare activ din motive aplicative dar si datorita problemelor fundamentale noi [12]. Cercetarile experimentale au stabilit ca fata de materialele masive la scala nanoscopica se produce o schimbare calitativa in comportamentul fononilor si interactia electron-fonon creste substantial. Un interes deosebit il prezinta situatiile de neechilibru, cum este cea a transferului de caldura in microdispozitivele electronice moderne de racire cu multiple aplicatii in nano- si microelectronica [11]. Configuratia tipica include un element metalic (de exemplu, un film de cupru) montate pe un element de suport izolator (de exemplu, o membrana de nitru de siliciu), grosimile fiind de ordinul zecilor nm . Cand curentul este injectat in stratul metalic,

in primul rand se produce o crestere a temperaturii sub-sistemului electronic, rețeaua cristalină ramanand la o temperatura mai mica. Intr-un regim cuasi-stationar fiecare subsistem este caracterizat de o temperatura proprie, T_e si T_p , iar fluxul de caldura este proportional cu diferenta acestora. Mecanismul principal de disipare a energiei electronilor consta in emisia si absorbtia de fononi prin intermediul cuplajului EPI. In metale diferenta de temperaturi poate atinge valori considerabile doar la temperaturi sub un Kelvin, cand rezistenta termica devine mare. Pentru materialul masiv rata de transfer a caldurii intre gazul electronic si oscilatiile rețelei este reprezentata prin urmatoarea expresie, [13],

$$P_{3D} = \Sigma_{3D} V_e (T_e^5 - T_p^5), \quad (1)$$

unde P este puterea de transfer, V_e volumul metalului si Σ este determinat de EPI prin mecanismul potentialului deformational. Se remarca insa o diferenta de un ordin de marime intre datele masuratorilor ($\Sigma \sim 10^9 \text{ W K}^{-5} \text{ m}^{-3}$) si valorile calculate ale lui Σ ($\sim 10^8 \text{ W K}^{-5} \text{ m}^{-3}$) in cadrul modelului microscopic. In structuri cu dimensiuni reduse, cum ar fi stratul subtiri sau nanofire, Eq.(1) nu corespunde masuratorilor nici macar calitativ, dependenta de temperatura fiind reprezentata de o putere mai mica T^x , $x < 5$ [14]. In [15] a fost propusa o descriere care tine cont de modificarile spectrului fononilor cauzate de existenta suprafetei, in particular, de modurile fononice Rayleigh. Insa, contrar asteptarilor, s-a obtinut o crestere a lui x ($3 < x < 6$). In studiul nostru am pornit de la ideea ca la temperaturi suficient de mici gazul fononic manifesta un comportament balistic, insemnand ca de fapt imprastierea fononilor este dominata de granitele structurii considerate, i.e. modurile colective de vibratii corespund unei placi elastice, Fig.1. Acestea sunt definite ca moduri Lamb dilatationale (s) si de flexiune (a) [12]. A treia clasa de moduri proprii, cele de forfecare, nu cupleaza cu electronii prin intermediul potentialului deformational. Aceste argumente se bazeaza pe faptul ca insusi caracterul cuasi-bidimensional al fononilor se poate manifesta doar atunci cand se atinge temperatura de crossover $T^* \simeq \pi c_s \hbar / (k_B L) \simeq 1 \text{ K}$, cand lungimea de unda a sunetului cu viteza caracteristica c_s ($\sim 4000 \text{ m/s}$) devine comparabila cu grosimea placii $L \sim 100 \text{ nm}$. In acest caz undele de vibratii relevante termic (i.e. de energie joasa) sunt cele de lungime mai mare de unda, care se pot propaga in planul filmului. In cazul cand stratul metalic de grosimea d si aria suprafetei A este depus peste un strat izolator, vom trata acest film compus cu volumul $V_p = LA$ ca unul uniform in ce priveste proprietatile acustice, justificarea constand in faptul ca la temperaturile $T < T^*$ de interes sunt doar undele mai lungi decat L .

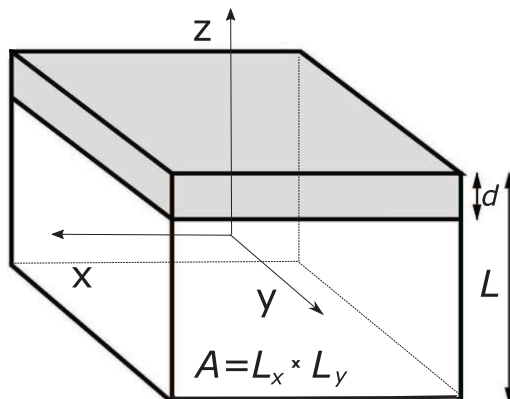


Figure 1: Originea sistemului de coordonate este in centrul placii de grosimea $L < 100 \text{ nm}$, stratul metalic are grosimea d (gri).

Deoarece lungimea de unda tipica pentru excitatiile electronice in metale este mult mai mica decat cea a fononilor, starea electronica se presupune a fi Fermi gas 3D (FG) din metalul masiv cu dispersia

$$\epsilon(\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{||}, k_z)) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m,$$

si functia de unda

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) &= \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\epsilon t) / \sqrt{V_e} \\ &= \psi(k_z; z) \exp(i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel} - i\epsilon t) / \sqrt{A}.\end{aligned}$$

Aici $V_e = dA$ si $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$ este vectorul de unda electronic si $\psi(k_z; z)$ proiectia functiei de unda pe directia ortogonala filmului, Fig.1

$$\psi(k_z; z) = \sqrt{\frac{1}{d}} \exp(ik_z(z + d - L/2)). \quad (2)$$

Trebuie mentionat ca si existenta starii cuantice de tip Quantum Well (Fermi gas cuasi- 2D) a electronilor este o alternativa realizabila experimental in straturi ultrasubtiri.

Prin cuantizarea campului de deplasare a mediului elastic $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ din teoria elasticitatii se obtine urmatoarea reprezentare cuantica in termenii operatorilor fononici $a_{\xi}(\mathbf{q})$, unde $\xi = a, s$ si $\mathbf{q} = \mathbf{q}_{\parallel}$ este vectorul de unda din planul de propagare al undelor Lamb \mathbf{r}_{\parallel} :

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\xi, \mathbf{q}} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\xi}(\mathbf{q})}} [a_{\xi}(\mathbf{q}) + a_{\xi}^{\dagger}(-\mathbf{q})] \mathbf{u}_{\xi}(\mathbf{q}, z) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_{\parallel} - i\omega_{\xi}t). \quad (3)$$

M este masa totala si vectorul \mathbf{u} pentru undele Lamb are doar doua componente, $(u_x, 0, u_z)$. Frecventele proprii sunt determinate de parametrii $q_{l,t}$

$$\omega_{\xi}(\mathbf{q}) = c_l \sqrt{q_{l,\xi}^2 + q^2} = c_t \sqrt{q_{t,\xi}^2 + q^2},$$

care, la randul lor, se obtin din ecuatiile lui Lamb, e.g. pentru moduri dilatationale avem

$$\frac{-4q^2 q_t q_t}{(q^2 - q_t^2)^2} = \frac{\tan(q_t L/2)}{\tan(q_l L/2)}. \quad (4)$$

Aici c_t este viteza acustica transversala si c_l cea longitudinala pentru materialul respectiv. Din structura solutiilor reiese ca la temperaturi suficient de joase ne putem limita doar la cele de tip acustic pentru a calcula elementele matricei de cuplaj a Hamiltonianului EPI

$$H_{e-p} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \xi, n, n'} \left[g_{\xi, \mathbf{q}_{\parallel}}^{n', n} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}_{\parallel}, n'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, n} a_{\xi}(\mathbf{q}_{\parallel}) + \left(g_{\xi, \mathbf{q}_{\parallel}}^{n', n} \right)^* c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_{\parallel}, n'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, n} a_{\xi}^{\dagger}(\mathbf{q}_{\parallel}) \right], \quad (5)$$

unde

$$g_{\xi, \mathbf{q}}^{n', n} = \frac{2}{3} E_F F_{\alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\xi}(q)}} \int_{L/2-d}^{L/2} \psi^*(k'_z; z) \psi(k_z; z) \left(iq \cdot \mathbf{u}_{\xi}(\mathbf{q}, z) + \frac{\partial u^z(\mathbf{q}, z)}{\partial z} \right) dz. \quad (6)$$

In Eq. (6) F_{α} sunt coeficientii de normare ai amplitudinilor fononice $\mathbf{u}_{\xi}(\mathbf{q}, z)$, care joaca un rol deosebit de important in evaluarea cantitativa a puterii calorice transferate in procesul de imprastiere

$$P = 2 \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \alpha, k_z, k'_z} \hbar \omega_{\alpha} \left(\Gamma_{\alpha, k_z, k'_z}^{\text{em}}(\mathbf{k}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}) - \Gamma_{\alpha, k_z, k'_z}^{\text{ab}}(\mathbf{k}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) \right). \quad (7)$$

Eq.(7) contine termenii de emisie si absorptie a fononilor, e.g.

$$\Gamma_{\alpha, k_z, k'_z}^{\text{em}}(\mathbf{k}_{\parallel} \rightarrow \mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| g_{\alpha, \mathbf{q}_{\parallel}}^{k_z, k'_z} \right|^2 [n(\hbar\omega_{\alpha}/k_B T_{ph}) + 1]$$

$$f(\epsilon_{\mathbf{k}_{||},k_z}/k_B T_e)[1 - f(\epsilon_{\mathbf{k}_{||}-\mathbf{q}_{||},k'_z}/k_B T_e)] \delta(\epsilon_{\mathbf{k}_{||},k_z} - \epsilon_{\mathbf{k}_{||}-\mathbf{q}_{||},k'_z} - \hbar\omega_\alpha). \quad (8)$$

Solutia ecuatiilor (4) pentru modurile Lamb acustice se rezuma la urmatoarele expresii analitice

$$\omega^s \simeq 2q c_t \sqrt{1-\nu}, F_s^{-2} \simeq 16q^6 (3-4\nu)(1-\nu)^2, \quad q_t^s \simeq q\sqrt{3-4\nu}, \quad p_l^s \simeq q(1-2\nu).$$

$$\begin{aligned} \omega^a &\simeq q^2 L c_t \sqrt{(1-\nu)/3}, \quad F_a^{-2} \simeq (q^2 L)^6 (1-\nu)^2 / 36, \\ p_t^a &\simeq -q + q^3 L^2 (1-\nu) / 6, \quad p_l^a \simeq -q + q^3 L^2 \nu (1-\nu) / 6. \end{aligned} \quad (9)$$

Calcularea sumelor in expresiile (7) - (8) se face prin trecerea la reprezentarea continuata, e.g., $\sum_{k_z} = \frac{d}{2\pi} \int dk_z$. Pentru obtinerea termenilor principali dupa temperatura se face uz de relatia $\hbar\omega_\alpha, k_B T_e \ll \epsilon_{\mathbf{k}}$, care permite transcrierea Eq. (8) sub urmatoarea forma

$$P = P_0(T_e) - P_0(T_p), \quad (10)$$

unde

$$\begin{aligned} P_0(T_e) &= \sum_{\mathbf{k}_{||}, \mathbf{q}_{||}, k_z, k'_z, \alpha=s,a} \frac{32\pi \hbar^2 E_F^2}{9\rho A} \omega_\alpha |F_\alpha|^2 [q_t q (q_t^2 + q^2)]^2 \\ &\quad \times n(\hbar\omega_\alpha/k_B T_e) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}} - E_F) \delta(\epsilon_{\mathbf{k}_{||},k_z} - \epsilon_{\mathbf{k}_{||}-\mathbf{q}_{||},k'_z} - \hbar\omega_\alpha) \\ &\quad \times \left\{ \begin{array}{l} \cos^2(Lq_t/2), \alpha = s \\ \sin^2(Lq_t/2), \alpha = a \end{array} \right\} \left| \int_{L/2-d}^{L/2} \psi^*(k'_z; z) \psi(k_z; z) \left\{ \begin{array}{l} \cosh(zp_l), \alpha = s \\ \sinh(zp_l), \alpha = a \end{array} \right\} dz \right|^2. \end{aligned} \quad (11)$$

La tratarea cazului cand stratul metalic este depus pe un strat dielectric ($L > d$) proprietatile acustice ale sistemului compus sunt reprezentate de parametrii unui mediu omogen efectiv (e.g. densitatea de masa $\rho = \rho_1 d/L + \rho_2 (L-d)/L$, etc.) [16]:

$$\begin{aligned} \omega_a &\simeq q^2 \sqrt{\frac{\rho_1 d (1-J_1) (c_{t1} d)^2 + \rho_2 (L-d) (1-J_2) (c_{t2} (L-d))^2}{3(\rho_1 d + \rho_2 (L-d))}}, \\ \omega_s &\simeq 2q \sqrt{\frac{\rho_1 d (1-J_1) c_{t1}^2 + \rho_2 (L-d) (1-J_2) c_{t2}^2}{\rho_1 d + \rho_2 (L-d)}}, \end{aligned} \quad (12)$$

In final se ajunge la urmatoarele expresii pentru functiile din Eq. (10)

$$P_{0,s}(T_e)/V_e = \frac{\zeta(4)}{12\pi^2} \frac{(k_B T_e)^4 k_F^4 J^2}{\rho L \hbar^2 c_t^3 (1-J)^{3/2}}. \quad (13)$$

$$P_{0,a}(T_e)/V_e = \frac{0.0075 (k_B T_e)^4 k_F^4 J^2}{\rho L \sigma^3 \hbar^2 c_t^3 (1-J)^{3/2}} \left((\sigma-1)^2 \ln \left[4.4 \frac{\hbar \sigma^2 c_t \sqrt{1-J}}{L k_B T_e} \right] + \frac{1}{2} \right), \quad (14)$$

unde $\sigma = L/d$. Factorul $\hbar \sigma^2 c_t \sqrt{1-J}/(L k_B)$ este de ordinul temperaturii de crossover T^* si astfel contributia logaritmului este pozitiva pentru T_e/T^* . Este important de mentionat ca modurile de flexiune in cazul unui film metalic suspendat ($\sigma = 1$) dau o contributie comparabila cu cea a modurilor dilatationale, in contrast cu argumentele din lucrarile [19, 20] in care este considerat un film semiconductor. Aceasta diferenta se explica prin faptul ca intr-un strat metalic imprastierea electronilor gazului Fermi 3D pe fononi, care se propaga de-a lungul filmului, nu conserva componenta normala a impulsului ($\hbar k_z$). Cauza fundamentala este absenta simetriei de translatie in directia respectiva si cuplarea electronilor cu campul de deplasari specific modurilor Lamb, care are componenta z nenula.

In Fig.2 rezultatele obtinute sunt comparate cu masuratorile facute in [17, 18] pentru structura filmului M1 $Cu - SiN_x$ in cazul $d = 14$ nm $L = 44$ nm.

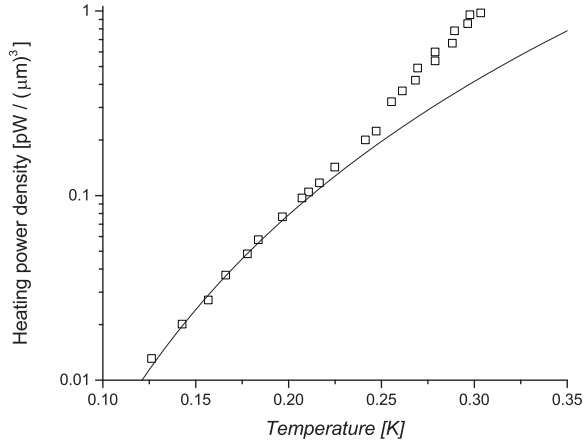


Figure 2: Densitatea puterii de transfer a caldurii între electroni și fononi calculată ca funcție de temperatura T_e din Eq. (13), linia continuă. Datele experimentale pentru structura metal-izolator $Cu - SiN_x$ sunt preluate din [17, 18] (vezi textul).

Acordul cantitativ al descrierii propuse cu datele experimentale confirmă că mecanismul de împrăștiere este identificat corect. Crossover-ul de la gazul fononic $3D$ la cel $2D$ are loc pentru $T < T^*$ și este asociat cu schimbarea dependenței de temperatură și cu o creștere puternică (de un ordin de mărime) a transferului de căldură datorat acestui mecanism. Prezența dependenței logaritmice de tipul $P \sim T^4 \ln T$ corespunde cu estimarea făcută pe baza fitării rezultatelor experimentale cu ajutorul expresiei T^x ($x < 4.5$) [17, 18].

3 Sisteme cu două nivele în dispozitive optoelectronice

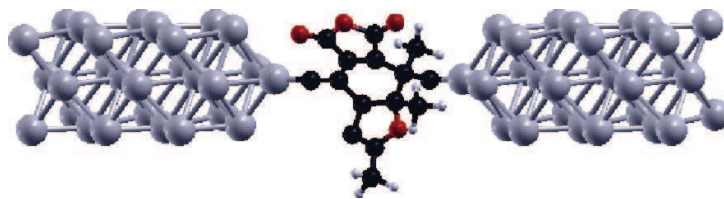
Nanodetectorii de înaltă sensibilitate se pot dezvolta pe baza unor sisteme moleculare ce prezintă două stări distincte, care pot fi activate optic, termic, magnetic. Comutatoarele moleculare fotocromice constituie un exemplu de astfel de sisteme investigate recent, atât din punct de vedere teoretic cât și experimental, care pot avea aplicații și în tehnologia de stocare optică.

Considerăm un nanodetector în care elementul activ este o moleculă din clasa fulgide, conectată la doi electrozi metalici de dimensiuni nanoscopice. Sistemul este descris în Figura 3.

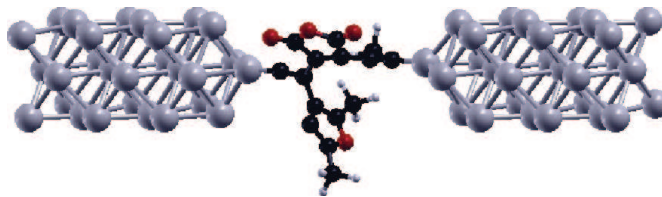
Prin iluminare cu radiație în spectru vizibil și în UV, conformațiile moleculelor fotocromice de tip fulgide sunt interschimbate, ceea ce induce o modificare în răspunsul electric. În mod uzual se atasează celor două stări de conducție stările ON și OFF. Raportul între curenții în cele două stări este o măsură care caracterizează fiabilitatea dispozitivului.

Analizăm în continuare caracteristica de transfer a sistemului, care depinde de configurația moleculei. Pentru a descrie optimizarea structurală, inclusiv cuplajul cu electrozii, este utilizată teoria funcționalei de densitate (DFT). Metoda computațională folosită este SIESTA, în care avantajul major constă în utilizarea unui set de funcții de bază localizate, ceea ce permite scalarea liniară a timpului de calcul. Este utilizată aproximația locală a densității (LDA) în parametrizarea lui Ceperley și Alder. Relaxările structurale sunt efectuate folosind o schema Monkhorst-Pack de tipul $1 \times 1 \times 10$, având o toleranță pentru forțele reziduale de $0.04 \text{ eV}/\text{Å}$.

Electrozii nanoscopici sunt alcațuiți printr-o repetiție a planurilor de tip A-B pe direcția $[001]$ cfc-Al, având 9 atomi în celula unitate. Ca urmare a procesului de relaxare, rețeaua cristalină a electrodului nanoscopic de Al suferă modificări, straturile ce conțin 5 atomi (A) fiind ușor contractate, iar cele cu 4 atomi (b) ușor dilatate. De asemenea, structura se contractă în lungul direcției de transport, distanța dintre straturile A și B devenind $2 \times d_{AB} = 3.8 \text{ Å}$, care



(a) Inel inchis (stare OFF)



(b) Inel deschis (stare ON)

Figure 3: Structura dispozitivului avand la baza molecula din clasa fulgide: (a) conformatie de tip inel inchis, (b) conformatia de tip inel deschis.

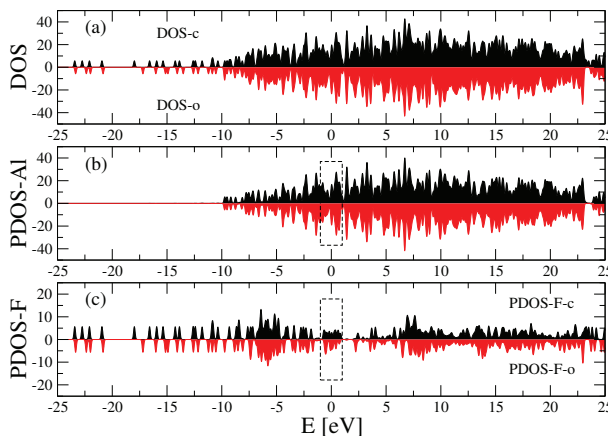


Figure 4: Densitati de stari: (a) Densitatea de stari totala in sistemul format din electrozi si molecula; (b) Densitatea de stari partiala corespunzatoare electrozilor de Al; (c) Densitatea de stari corespunzatoare moleculei fulgide in cele doua configuratii, inel inchis-deschis.

este mai mica decat valoarea tipica corespunzatoare constantei de retea in cristalul masiv, $a_0^{Al} = 4.05\text{\AA}$. Aceasta situatie este tipica sistemelor nanoscopice quasi-1D sau clusteri atomici, in care legaturile nesatisfacute in vecinatatea suprafetelor conduc la micșorarea distantelor interatomice. Pornind de la aceste date structurale, sistemul total continand electrozii si molecula este optimizat.

Mai intai este analizata densitatea de stari totala si cele partiale, corespunzatoare moleculei si electrozilor metalici, descrise in Fig. 4. Se observa ca pentru sistemul compus se obtine suprapunerea celor doua spectre energetice. Caracteristica de transfer a sistemului este analizata folosind formalismul functiilor Green de ne-echilibru. Functia de transmisie este determinata pentru cele doua configuratii, *inel inchis* si *inel deschis*. In regim liniar functia de transmisie este descrisa in Fig. 5. Mai intai este analizata functia de transmisie pentru firul nanoscopic ideal de Al, obtinandu-se o caracteristica ideala in trepte. Acestea sunt corelate cu densitatea partiala din Fig. 4(b). In mod similar densitatii partiale de stari, functia de transmisie nu prezinta gap-uri, ceea ce confirma proprietatile de conductie bune ale electrozilor nanoscopici de Al, in ciuda dimensiunilor lor reduse. In cazul sistemului compus, in transmisie sunt selectate stările corespunzatoare sistemului molecular. Rezulta o serie de maxime care se pot explica prin suprapunerea densitatilor de stari partiale ale contactelor si moleculei, Fig. 4(a) si 4(b).

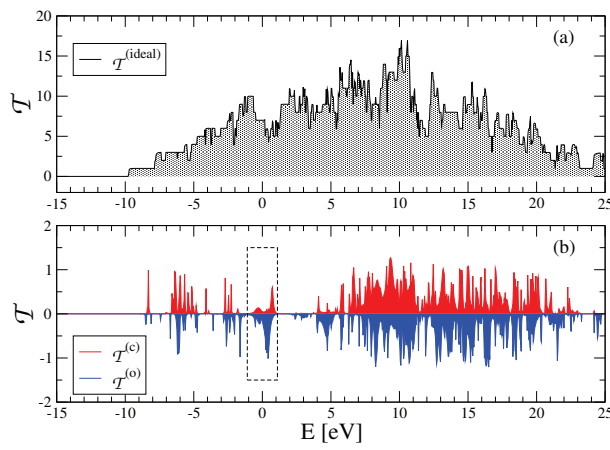


Figure 5: (a) Functia de transmisie in cazul firului de Al ideal. (b) Functiile de transmisie pentru sistemul alcatuit din electrozi nanoscopici Al si molecula fulgide, in cele doua conformatii.

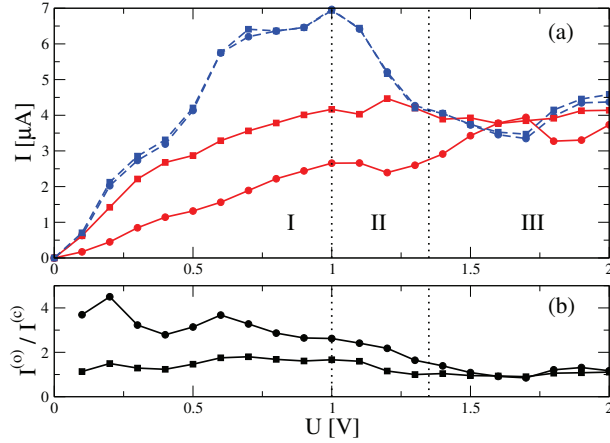


Figure 6: Regim de tensiune neliniar. (a) Curentii in cele doua conformatii (inel inchis-rosu, inel deschis-albastru) pentru structuri de tip *furyl fulgide* (cercuri) si *thiophene fulgide* (patrate). (b) Raportele curentilor in cele doua stari.

Regiunea delimitata cu linie punctata in Fig. 5(b) scoate in evidenta faptul ca, in proximitatea nivelului Fermi, curbele de transmisie indica valori diferite pentru configuratiile de tip *inel inchis* si *inel deschis*.

In regim de tensiune neliniar, raportul dintre curentii corespunzatori celor doua stari este semnificativ, asa se cum poate vedea din Fig. 6. Sunt analizate comparativ doua sisteme inrudite, *furyl* si *thiophene fulgide*, ultimul obtinut prin inlocuirea unui atom de oxygen cu unul de sulf. In configuratia inel deschis, substitutia nu aduce modificari importante, inasa in configuratia inel inchis caracterul electronegativ mai puternic a oxigenului localizeaza mai bine electronii si astfel conductanta este mai mare in cazul structurii bazate pe *thiophene fulgide*. Rezulta ca raportul ON/OFF este mai mare in cazul structurii de tip *furyl fulgide*, asa cum este indicat in Fig. 6(b).

Mai multe detalii se pot gasi in lucrarea **RSC Advances** **5**, **26438** (**2015**) (FI=3.84).

4 Descrierea sistemelor de particule in interactie ca gaze ideale cu statistica fractionara – aplicatie la teoria BCS

Hamiltonianul BCS al unui supraconductor este

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}l} V_{\mathbf{k}l} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow}, \quad (15)$$

unde $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)}$ sunt energiile particulelor libere, iar $V_{\mathbf{k}l}$ sunt elementele de matrice ale Hamiltonianului de imperechere. In urma unei proceduri standard, care include anumite aproximatii, acest Hamiltonian se diagonalizeaza:

$$\mathcal{H}_M = \mathcal{H} - \mu N = \sum_{\mathbf{k}} (\xi_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^*) + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}0}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}0} + \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}1}), \quad (16)$$

unde $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \mu$, $\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}$ si $\Delta_{\mathbf{k}}$ este energia de gap,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_l V_{\mathbf{k}l} \langle c_{-\mathbf{l}\downarrow} c_{\mathbf{l}\uparrow} \rangle. \quad (17)$$

Operatorii $\gamma_{\mathbf{k}i}^\dagger$ si $\gamma_{\mathbf{k}i}$ ($i = 0, 1$) de creare si anihilare a particulelor sunt definiti de relatiile

$$c_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger, \quad (18a)$$

$$c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1}, \quad (18b)$$

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = -v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}0} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}1}^\dagger, \quad (18c)$$

$$c_{-\mathbf{k}\downarrow} = -v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}0}^\dagger + u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}1}. \quad (18d)$$

In urma eliminarii energiei supraconductorului la $T = 0$, Hamiltonianul efectiv ramane

$$\mathcal{H}_{eff} \equiv \mathcal{E}_c + \sum_{\mathbf{k}i} \epsilon_{\mathbf{k}i} \gamma_{\mathbf{k}i}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}i} \quad (19)$$

iar energia efectiva este media $E_{eff} \equiv \langle \mathcal{H}_{eff} \rangle$. In Eq. (19) atat Δ , cat si $\epsilon_{\mathbf{k}i}$ ($i = 0, 1$), depind de populatiile $n_{\mathbf{k}i}$. Prin urmare energia efectiva este aceea a unui sistem de fermioni cu interactie descrisi ca in teoria lichidului Fermi:

$$E_{eff}(\{n\}) = \mathcal{E}_c(\{n\}) + \sum_{\mathbf{k},i} n_{\mathbf{k}i} \epsilon_{\mathbf{k}i}(\{n\}), \quad (20)$$

unde prin $\{n\}$ specificam in mod explicit dependenta lui \mathcal{E} si a lui $\epsilon_{\mathbf{k}i}$ de setul de populatii. Energia de cuasiparticula intr-un lichid Fermi este chiar energia de cuasiparticula BCS

$$\epsilon_{\mathbf{k}i} = \frac{\partial E_{eff}}{\partial n_{\mathbf{k}i}}, \quad (21)$$

care conduce la distributia BCS de echilibru cunoscuta

$$n_{\mathbf{k}i} = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_{\mathbf{k}i}} + 1}. \quad (22)$$

Energiile de cuasiparticula sunt definite in asa fel incat

$$E_{eff} = \sum_{\tilde{\epsilon}, i} n_{\tilde{\epsilon}i} \tilde{\epsilon}, \quad (23)$$

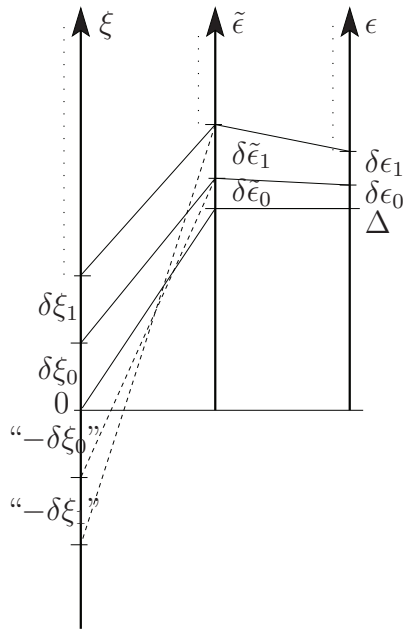


Figure 7: The FES quasiparticle species represented as intervals on the FES quasiparticle energy axis (middle) $\delta\tilde{\epsilon}_0, \delta\tilde{\epsilon}_1, \dots$. Each species corresponds to two intervals (symmetric with respect to the origin, i.e. the Fermi surface) on the ξ axis (left) and one interval on the ϵ axis (right). The relations between ξ , ϵ , and $\tilde{\epsilon}$ are given in Eqs. (25). Both, ϵ and $\tilde{\epsilon}$, have the same energy gap Δ .

Noile energii de cuasiparticula sunt legate de ϵ prin relatia

$$\tilde{\epsilon}(\epsilon) \equiv \epsilon + \frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}(N_{ex} + 1)} N_\epsilon^< \approx \epsilon + \frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}^2} N_\epsilon^< \equiv \xi + (\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2} - \xi) + \frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}^2} N_\epsilon^<, \quad (24a)$$

unde $N_\epsilon^<$ este numarul de excitatii de sub nivelul ϵ , adica

$$N_\epsilon^< \equiv \sigma_0 \int_{-\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}}^{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2}} (n_{\xi_0} + n_{\xi_1}) d\xi = 2\sigma_0 \int_{\Delta}^{\epsilon} (n_{\epsilon'0} + n_{\epsilon'1}) \frac{\epsilon' d\epsilon'}{\sqrt{(\epsilon')^2 - \Delta^2}}. \quad (24b)$$

(vezi figura 7). Gazul ideal astfel obtinut are statistica generalizata FES (fractional exclusion statistics) [21, 22].

Noile energii de cuasiparticula satisfac Eq. (23). Inversand Eq. (24a) obtinem

$$\epsilon(\tilde{\epsilon}) = \tilde{\epsilon} - \frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}^2} N_\epsilon^< \quad \text{and} \quad \xi(\tilde{\epsilon}) = \pm \sqrt{\left(\tilde{\epsilon} - \frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}^2} N_\epsilon^<\right)^2 - \Delta^2}. \quad (25)$$

Din Eq. (24a) vedem ca $\tilde{\epsilon}(\epsilon = \Delta) = \Delta$, deci energiile de cuasiparticula FES prezinta aceeasi energie de gap ca si cuasiparticulele BCS. In Fig. 8 sunt plotate pentru comparatie energiile de cuasiparticula BCS (ϵ) si FES ($\tilde{\epsilon}$).

Daca introducem in Hamiltonianul BCS o interactie suplimentara intre particule [23]

$$\mathcal{H}' \equiv \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \sigma_1 \sigma_2} \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \sigma'_1 \sigma'_2} V'_{\mathbf{k}_1 \sigma_1 \mathbf{k}_2 \sigma_2; \mathbf{k}'_1 \sigma'_1 \mathbf{k}'_2 \sigma'_2} c_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}^\dagger c_{\mathbf{k}'_2 \sigma'_2} c_{\mathbf{k}'_1 \sigma'_1} \quad (26)$$

si introducem din nou operatorii de creare si anihilare de cuasiparticule γ (Eqs. 18), obtinem energiile starilor BCS in forma

$$E'_{eff}(\{n\}) \equiv \mathcal{E}_c + \sum_{\epsilon, i} \epsilon n_{\epsilon i} + \frac{1}{2} \sum_{\epsilon, \epsilon', i, j} V_{\epsilon i; \epsilon' j} n_{\epsilon i} n_{\epsilon' j}, \quad (27)$$

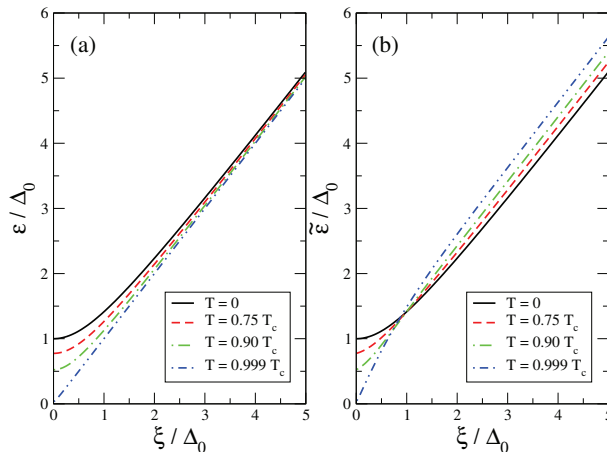


Figure 8: (Color online) Quasiparticle energies vs. ξ , for three different temperatures $T = 0, 0.75, 0.9, 0.999 T_c$: (a) $\epsilon(\xi)$ and (b) $\tilde{\epsilon}(\xi)$. At $\xi = 0$ we have $\tilde{\epsilon} = \epsilon = \Delta(T)$ for any T .

in loc de E_{eff} din Eq. (19). Introducand energii de cuasiparticula de tip FES [3],

$$\tilde{\epsilon}^{(p)}(\epsilon) = \epsilon + \frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}^2} N_\epsilon^< + \sum_{\epsilon' < \epsilon} \sum_j V_{\epsilon i; \epsilon' j} n_{\epsilon' j}. \quad (28)$$

putem scrie $E'_{eff}(\{n\}) = \sum_{\tilde{\epsilon}^{(p)}} \tilde{\epsilon}^{(p)} n_{\tilde{\epsilon}^{(p)}}$ ca un Hamiltonian de gaz ideal. In cazul mai simplu in care $V_{\epsilon i; \epsilon' j} = V_I$ nu depinde de ϵ, ϵ', i , si j , ecuatiile (27) si (28) se schimba in

$$E'_{eff} = \left(\mathcal{E}_c + \frac{V_I N_{ex}^2}{2} \right) + \sum_{\epsilon, i} \epsilon n_{\epsilon i} \quad \text{and} \quad \tilde{\epsilon}^{(p)}(\epsilon) = \epsilon + \left(\frac{2\mathcal{E}_c}{N_{ex}^2} + V_I \right) N_\epsilon^<. \quad (29)$$

Energiile Landau de cuasiparticula sunt

$$\epsilon^{(p)}(\epsilon) \equiv \frac{\partial E'_{eff}}{\partial n_\epsilon} = \epsilon + V_I N_{ex}, \quad (30)$$

ceea ce duce la populatiile

$$n(\epsilon') = \frac{1}{e^{\beta \epsilon'} + 1}. \quad (31)$$

Energiile de gap pentru cuasiparticulele FES (28) si Landau (30) sunt plotate in Fig. 9. Observam ca in acest caz, in principiu energia de gap se intinde pana la $T = \infty$. Totusi, datorita faptului ca aceasta energie se calculeaza in ordinul 1 de perturbatie, ne asteptam ca relatiile sa nu fie valide la temperaturile la care aceasta devine aproximativ egala cu energia suplimentara de interactie V_i .

Prin urmare in aceasta lucrare am folosit din nou formalismul statisticii fractionare pentru a transforma sistemul de cuasiparticule BCS, care este un lichid Fermi, intr-un gaz de particule ideale. In plus, am adaugat o interactie suplimentara la Hamiltonianul BCS si am studiat efectul acesteia asupra parametrilor sistemului. Am observat ca temperatura critica se maresc in principiu pana la infinit. Nu ne asteptam insa ca formalismul sa fie valabil si la temperaturi la care energia de gap este comparabila cu energia suplimentara de interactie.

Lucrarea a fost trimisa la publicat la Physica A (arXiv:1512.08703)