

# Raport stiintific

*privind implementarea proiectului in perioada  
octombrie 2011 – octombrie 2013*

## 1 Introducere

Pe parcursul acestui proiect am abordat problemele propuse pe mai multe directii. **In primul rand** am avansat destul de mult in dezvoltarea de metode generale bazate pe statistica de exclusiune fractionara (FES, de la *fractional exclusion statistics*) pentru descrierea sistemelor de (cuasi)particule.

FES a fost introdusa in fizica de Haldane in anul 1991 [1] si a fost aplicata in general pe sisteme mai mult sau mai putin abstracte, cum ar fi in efectul Hall cuantic fractionar, excitatii si motive de spini in lanturi de spini [1, 2, 3, 4, 5], sisteme bosonice si fermionice descrise in formalismul TBA (de la *thermodynamic Bethe ansatz*) [6, 7, 8, 9], gaze atomice reci in capcane magnetice, descrise in aproximatia campului mediu [10, 11, 12, 13], etc. De asemenea au mai fost studiate sisteme FES generice de diferite dimensionalitati [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22] si corelatiile care apar in acestea [23]. Cu toate acestea, aria de aplicabilitate a FES a ramas restransa, nefiind dezvoltata ca un formalism general de descriere a sistemelor de particule in interactie.

Extinderea aplicabilitatii FES a putut fi facuta dupa o serie de amendamente pe care le-am adus formalismului pe parcursul mai multor ani [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30]. Aceste amendamente, desi foarte criticate la inceput, s-au impus in comunitatea stiintifica si au fost citate ca *regulile Anghel* [4, 5]. Prin aceasta noua abordare, sistemele de particule cu interactie pot fi descrise la modul destul de general ca sisteme de particule ideale care satisfac FES. Prin urmare putem spune foarte concis ca statisticile Bose si Fermi se aplica la gazele ideale, pe cand FES este statistica pentru sistemele de particule reale.

In Refs. [31, 32] am aratat ca in sisteme 1D conductivitatea termica este independenta de statistica *la orice temperatura*, punand astfel in evidenta un fenomen universal si corelandu-l cu un alt fenomen similar, anume *echivalenta termodinamica* a sistemelor cu densitatea de stari (DOS) constanta [33, 34, 35, 36] (Sectiunea 2.1).

In Refs. [37, 38] am aratat metoda generala prin care sisteme de particule cu interactie pot fi descrise ca gaze ideale de particule care satisfac FES. In Ref. [39] am aplicat FES la modelul Walecka [40, 41] – un model foarte utilizat in fizica nucleara – si am aratat consecintele pe care le poate avea extinderea statisticii (Sectiunea 2.2). Am extins aplicabilitatea FES la sisteme de particule care interactioneaza la distanta in Refs. [13, 42, 43], unde am dat metoda de calcul a energiilor de cuasiparticula FES, a densitatii de stari si a parametrilor FES. Speciile sunt redefinite pentru a include grade noi grade de libertate – vectorul de pozitie – si astfel devine posibila analiza sistemelor neomogene de particule cu interactie. Metoda de calcul a fost verificata in Ref. [13], unde am demonstrat echivalenta dintre descrierea FES si descrierea in formalismul teoriei lichidelor Fermi a lui Landau (FLT, de la *Fermi Liquid Theory*). Aceasta arata posibilitatile FES, dar si faptul ca este formalismul propus de noi este corect (Sectiunea 2.3).

In Ref. [44] am aratat ca un sistem FES general poate fi redefinit ca un gaz de bosoni, sau fermioni in interactie, inchizand in acest fel demonstratia echivalentei dintre gazele FES ideale si sistemele de particule in interactie.

Sisteme dezordonate cu stari localizate au fost analizate din perspectiva FES in Ref. [43]. In cazul sistemelor cu interactie Coulombiana ecranata sunt punctate efecte datorate interfetelor, segregari de quasi-particula la energii joase in sisteme cu proprietati vitroase, precum si deviatii in comportamentul caldurii specifice la diferite temperaturi [13, 42].

**A doua directie de investigatie** a fost legata de proprietatile sistemelor dezordonate (Sectiunea 3). In ciuda a patru decenii in care s-au studiat proprietatile vitroase ale materialelor [45, 46, 47, 48], natura sistemelor cu doua nivele (TLS, de la *two-level systems*) – entitatile ipotetice responsabile pentru aceste proprietati – este inca necunoscuta. La modul general este acceptata ideea ca ele reprezinta defecte dinamice, de genul unui atom, sau al unui grup de atomi care pot tunela intre doua configuratii de energime minima locala distincte, dar degenerate in energie. Acesti atomi nu sunt identificati, sau, chiar daca sunt (in cazul cristalelor cu defecte), spectrul TLS nu poate fi calculat pe baza unui model microscopic. In scopul elucidarii acestor probleme, studiul proprietatilor vitroase anisotrope in cristale dezordonate, sau quasicristale, este important deoarece furnizeaza informatii suplimentare despre natura TLSurilor.

In Ref. [49] am propus o extensie a modelului standard de tunelare (STM, de la *standard tunneling model*) in scopul explicarii proprietatilor termice ale membranelor mesoscopice [50]. Acest model s-a dovedit util in interpretarea proprietatilor vitroase in cristale anisotrope [51, 52, 53, 54], iar acum l-am aplicat pentru explicarea proprietatilor vitroase ale cuasicristalelor [55] (Sectiunea 3.1). Pe langa aceasta am realizat un model fenomenologic pentru testarea presupunerilor de baza ale modelului TLS. Modelul este inca in lucru, dar deja am reusit sa rasturnam o serie de paradigme folosite in STM (Sectiunea 3.2).

Tot legat de aceasta directie de cercetare, am mai studiat si efectul dezordinii asupra proprietatilor termice ale sistemelor de diferite dimensionalitati, implementand un algoritm bazat pe FES [42], asa cum vom arata in Sectiunea 3.3.

**Cea de-a treia directie de cercetare** consta in calcularea transportului de particule si de caldura in sisteme mesoscopice. Aceasta se realizeaza prin calcularea modurilor fononice in aceste sisteme si a interactiei acestora cu defectele. Astfel, am calculat modurile fononice din fire atomice si efectul defectelor asupra acestor moduri, folosind metode ab-initio. In felul acesta incercam sa simulam interactia dintre fononi si sistemele cu doua nivele in fire si membrane nanoscopice (Sectiunea 4.1).

Este analizat de asemenea transportul de spin prin sisteme quasi unu-dimensionale, cum ar fi membrane la scara atomica si nanofire, utilizand formalismul teoriei functionalei de densitate. Impuritatile magnetice au rolul unor sisteme cu doua nivele care, in analiza efectuata, pot avea doua orientari de spin – tip Ising. Rezultatele obtinute indica o buna polarizare a curentului de spin, ceea ce sustine ideea ca structurile investigate pot sta la baza unor dispozitive de tip spin-filtru sau detectori magnetici (Sectiunea 4.2).

**Cea de-a patra directie de cercetare** a fost investigarea proprietatilor magnetice ale nanostructurilor. Nanosistemele au in general proprietati remarcabile, diferite de cele ale sistemelor macroscopice. In lucrarile [56, 57] am studiat dependentia magnetizarii unei nanoparticule (NP) de dimensiunea acesteia, de forma geometrica si de mediul din care aceasta face parte. Am constatat in acest fel deosebiri calitative majore intre proprietatile NP si cele ale sistemelor macroscopice, precum si devieri de la teoriile fenomenologice standard utilizate.

Detalii despre activitatile de cercetare enumerate mai sus gasiti in urmatoarele sectiuni. Lucrarile publicate pe parcursul acestui proiect se gasesc in sectiunea 6, iar cateva date despre alte activitati desfasurate pe parcursul proiectului gasiti in Sectiunea 7.

## 2 Aplicatii ale statisticii fractionare

### 2.1 Aspecte universale in sisteme cu statistica generalizata

Denumirea de *echivalenta termodinamica* a fost introdusa de M. H. Lee in Ref. [35] si se refera la proprietatea gazelor bidimensionale ideale de bosoni si fermioni aflate in potential constant, de a avea caldura specifica,  $C_V$ , si entropia,  $S$ , independente de statistica. Acest lucru inseamna ca din punct de vedere termodinamic, in conditii canonice (sistemele pot schimba numai caldura) gazele de bosoni si fermioni formate din particule de aceeasi masa sunt identice.

Principiul lui Pauli a fost generalizat de Haldane in Ref. [1]. Aceasta generalizare a fost numita mai tarziu statistica de exclusiune fractionara (FES). Un gaz FES este format din mai multe *specii* de particule, aceste “specii” fiind de cele mai multe ori “grauntele” microscopice din spatiul fazelor obtinute printr-un proces de “coarse-graining”. Daca atribuim fiecarei specii un numar intreg, sa zicem  $i$ , sau  $j$ , atunci gazul FES este caracterizat printr-un set de parametri (parametri FES),  $\alpha_{ij}$ . Un rezultat remarcabil este acela ca daca  $\alpha_{ij} \equiv \alpha \delta_{ij}$  pentru orice  $i$  si  $j$ , atunci  $C_V$  si  $S$  in sisteme 2D nu depind de  $\alpha$  [36].

Asa cum am aratat in Ref. [36], proprietatea fizica a sistemului, care conduce la aceasta comportare termodinamica universala este densitatea constanta de stari uniparticula (DOS, de la *density of states*). Prin urmare putem spune ca, *toate gazele ideale care au aceeasi DOS, indiferent de statistica de exclusiune, sunt echivalente termodinamic.*

In Ref. [36] am aratat care este explicatia microscopica a echivalentei termodinamice: intre gaze ideale de statistica diferita se poate realiza o corespondenta biunivoca intre configuratii microscopice de stari care au aceeasi energie de excitatie. Cum in ansamblul canonic marimea fizica observabila este caldura, care este direct legata de energia de excitatie si de entropie (sau numarul de microconfiguratii), aceasta corespondenta implica similaritatea proprietatilor termice de echilibru ale sistemelor.

Un fenomen universal similar s-a observat si in cazul transportului de caldura prin fire cuasi uni-dimensionale: conductivitatea termica printr-un canal 1D este independenta de statistica la orice temperatura [58, 59, 31].

In Ref. [32] am discutat in paralel universalitatea proprietatilor termice ale sistemelor bidimensionale si universalitatea transportului de caldura prin canale unidimensionale, punand in evidenta similaritatea formalismelor matematice, precum si a interpretarilor microscopice.

### 2.2 Statistica fractionara in sisteme nucleare

Am aplicat formalismul FES la sisteme nucleare relativiste, descrise intr-un model de camp mediu relativist (RMF, de la *relativistic mean field*). RMF este un formalism general, construit pentru descrierea sistemelor nucleare many-body relativiste si care se bazeaza pe gradele de libertate hadronice [40, 60, 41, 61]. Acest model a fost aplicat cu succes la descrierea multor fenomene nucleare (vezi de exemplu [62]). FES este aplicata la descrierea nucleonilor in RMF, pentru a obtine un formalism general pentru studiul efectelor interactiei remanente din model. Aceasta metoda ar putea conduce la predictii importante legate de statistica particulelor si deci a efectelor interactiei remanente din sistem.

Am luat in considerare doua scenarii. In primul scenariu parametrii modelului care cuantifica taria interactiei dintre hadroni si campurile mezonice,  $C_s$  si  $C_v$ , sunt fixati pentru orice  $\alpha$  la valorile  $C_s^2 = 330$  si  $C_v^2 = 249$ , determinati din conditiile de echilibru din materia nucleara obisnuita. In cel de-al doilea scenariu,  $C_s$  si  $C_v$  sunt determinati pentru fiecare  $\alpha$  in parte, astfel incat punctul de saturatie in materia nucleara sa ramana neschimbat. Cele doua scenarii sunt reprezentate in Fig. 1.

In Fig. 2 se arata influenta statisticii asupra tranzitiei de faza in materia nucleara in fiecare din cele doua scenarii.

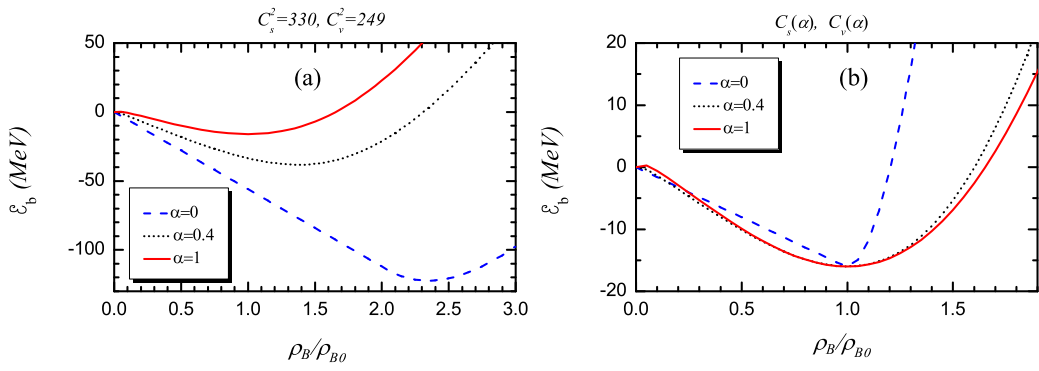


Figure 1: Energia de legatura pe nucleon,  $\mathcal{E}_b$ , ca functie de densitatea nucleara,  $\rho_B$ , pentru materia nucleara la temperatura zero si diferite valori ale lui  $\alpha$ . (a) Scenariul 1, cu  $C_s^2 = 330$  si  $C_v^2 = 249$  fixate pentru orice  $\alpha$ . (b) Constantele de cuplare  $C_s$  si  $C_v$  depind de  $\alpha$ , astfel incat punctul de saturatie (de energie minima) sa ramana neschimbat, la  $\mathcal{E}_b = -16$  MeV si  $\rho_B = 0.16 \text{ fm}^{-3}$ .

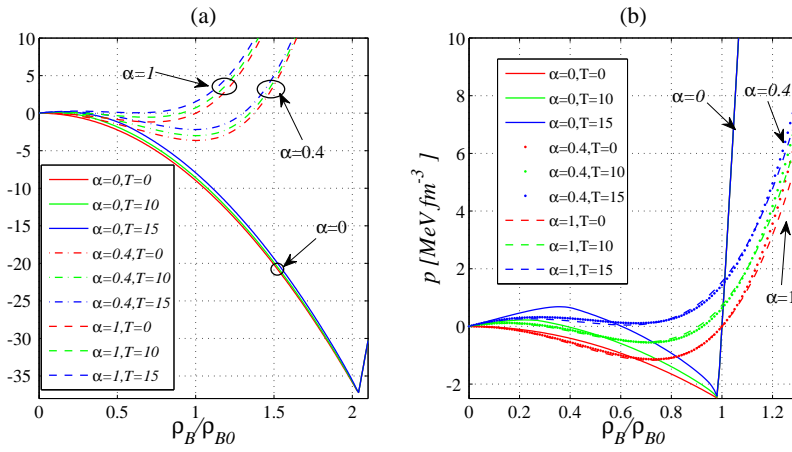


Figure 2: Presiunea ca functie de densitatea barionica, pentru diverse valori ale lui  $T$  si  $\alpha$  in cele doua scenarii: (a) pentru scenariul 1 si (b) pentru scenariul 2.

### 2.3 Statistica fractionara in sisteme de particule cu raza lunga de actiune

Vom considera sisteme cu stari localizate, dispuse spatial aleator intr-un solid  $s$ -dimensional de volum  $\Omega$ . Pozitiile acestor stari localizate sunt descrise de vectorii de pozitie  $\mathbf{r}_I$ ,  $I = 1, 2, \dots, N_0$ , unde  $N_0$  este numarul total de stari. Intrucut consideram un sistem de fermioni, fiecare stare poate acomoda maxim o particula. In absenta interactiilor intre particule, energia unei particule pe site-ul  $I$  este  $\epsilon_I$ .

Definim speciile ca fiind volume elementare in spatiul  $(s + 1)$ -dimensional pozitie-energie,  $\Omega \times \epsilon$ . Specia centrata pe punctul  $\mathbf{r} \times \epsilon$  va fi descrisa prin  $\delta\Omega_{\mathbf{r}} \times \delta\epsilon$ . Dacaa densitatea de stari este  $\sigma(\mathbf{r}, \epsilon)$ , atunci in specia  $\delta\Omega_{\mathbf{r}} \times \delta\epsilon$  avem  $G_{\delta\Omega_{\mathbf{r}}, \delta\epsilon} = \sigma(\mathbf{r}, \epsilon)\delta\Omega_{\mathbf{r}}\delta\epsilon$  stari si  $N_{\delta\Omega_{\mathbf{r}}, \delta\epsilon}$  particule. Pentru calcule termodinamice vom presupune ca ambele cantitati,  $G_{\delta\Omega_{\mathbf{r}}, \delta\epsilon}$  si  $N_{\delta\Omega_{\mathbf{r}}, \delta\epsilon}$  sunt mult mai mari decat unitatea si energia  $\epsilon$  va lua valori de la 0 la  $\infty$  in oricare din volumele elementare,  $\delta\Omega_{\mathbf{r}}$ .

Interactia dintre particule este dependenta doar de pozitie si o notam  $V(|\mathbf{r}_\xi - \mathbf{r}_\eta|)$  Energiile

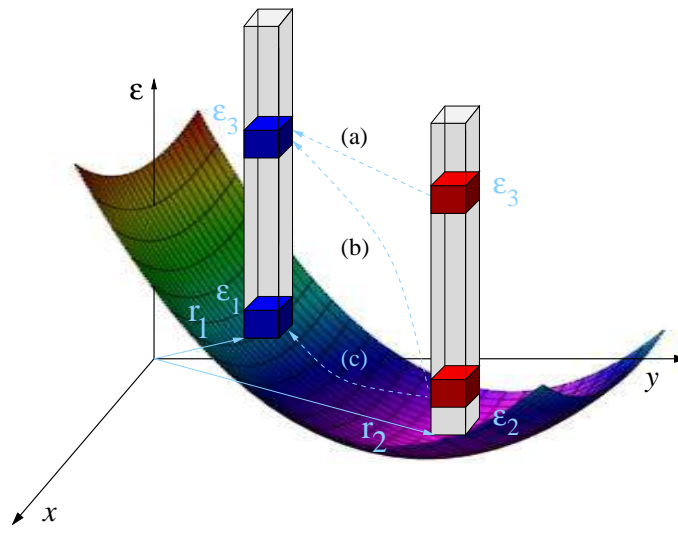


Figure 3: Modul de partitionare a spatiului real  $(x, y)$  si a energiei de cuasiparticula pentru a defini speciile si parametrii FES (detalii in Ref. [13]).

de cuasi-particula sunt definite astfel:

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_I} = \epsilon_{\mathbf{r}_i} + \sum_{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_J} < \tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_I}} V(|\mathbf{r}_I - \mathbf{r}_J|) n_{\mathbf{r}_J}. \quad (1)$$

unde  $n_{\mathbf{r}_I}$  este ocuparea unei stari la pozitia  $\mathbf{r}_I$ . In cazul cuasi-continuu, presupunand ca  $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}}(\epsilon) \geq \tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}'}(\epsilon')$  daca  $\epsilon \geq \epsilon'$ , Ec. (1) devine:

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}}(\epsilon) = \epsilon_{\mathbf{r}} + \int_{\Omega} d^s \mathbf{r} \int_0^{\epsilon} \sigma(\mathbf{r}, \epsilon') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n_{\mathbf{r}', \epsilon'}, \quad (2)$$

unde  $n_{\mathbf{r}, \epsilon}$  este populatia medie in volumele elementare  $n_{\mathbf{r}, \epsilon} \equiv N_{\delta\Omega_{\mathbf{r}}, \delta\epsilon} / G_{\delta\Omega_{\mathbf{r}}, \delta\epsilon}$ .

Cu ajutorul definitiei (2) se poate scrie densitatea de stari in spatiul  $\Omega \times \tilde{\epsilon}$ ,  $\tilde{\sigma}(\mathbf{r}, \tilde{\epsilon}) = \sigma(\mathbf{r}, \epsilon)(d\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}}(\epsilon)/d\epsilon)^{-1}$  si parametrii FES:

$$\alpha_{\xi i; \eta j} = \delta\Omega_{\xi} \left[ \delta_{ij} \sigma(\mathbf{r}_{\xi}, \epsilon_i) + \theta(i - j) \delta\epsilon_i \frac{\partial \sigma(\mathbf{r}_{\xi}, \epsilon_i)}{\partial \epsilon_i} \right] \times V(|\mathbf{r}_{\xi} - \mathbf{r}_{\eta}|), \quad (3)$$

in care primul dublet,  $(\xi i)$ , specifica specia in care numarul de stari se schimba, in timp ce al doilea dublet,  $(\eta j)$ , specifica specia in care numarul de particule se schimba;  $\theta(k)$  e o functie treapta,  $\theta(k > 0) = 1$  si  $\theta(k \leq 0) = 0$ . Merita notat ca parametrii  $\alpha_{\xi i; \eta j}$  respecta regulile din Ref. [27] si Ansatzul din [30].

Populatiile,  $n_{\xi i}$ , sunt obtinute rezolvand sistemul nelinier de ecuatii pentru fermioni

$$0 = \beta(\mu - \tilde{\epsilon}_i) + \ln \frac{1 - n_{\xi i}}{n_{\xi i}} + \sum_{\eta j} \alpha_{\eta j; \xi i} \ln[1 - n_{\eta j}]. \quad (4)$$

Observam ca populatiile  $n_{\xi i}$  sunt in general functii diferite de energie pentru fiecare pozitie  $\xi$ .

Densitatea de particule ca functie de energia de cuasi-particula poate fi exprimata prin  $\tilde{\rho}(\mathbf{r}_{\xi}, \tilde{\epsilon}_i) \equiv \tilde{\rho}_{\xi i} = n_{\xi i} \tilde{\sigma}_{\xi i}$ , iar densitatea de particule integrata (sumata) dupa energie se poate scrie  $\tilde{\rho}_{\xi} = \sum_i \tilde{\rho}_{\xi i}$ .

Solutia sistemului nelinier este gasita iterativ folosind metoda gradientului pornind de la o populatie initiala.

Acest model a fost extins in Ref. [13] la sisteme neomogene, in camp extern general,  $V(\mathbf{r})$ , descrise in aproximatia Thomas-Fermi (TF). Energia totala a sistemului este

$$E = \sum_i (\epsilon_i + V_i) n_i^{(\pm)} + \frac{1}{2} \sum_{ij} v_{ij} n_i^{(\pm)} n_j^{(\pm)}. \quad (5)$$

unde  $\epsilon_i$  este energia particulei fara interactie,  $V_i = \langle i | \hat{V}_{\text{ext}} | i \rangle$  este potentialul extern in baza functiilor uni-particula, iar  $v_{ij} = \langle ij | \hat{v} | ij \rangle \mp \langle ij | \hat{v} | ji \rangle$  sunt elementele de matrice ale potentialului de interactie pentru bosoni (simetrici) si fermioni (antisimetrici). Semnul de sus in notatia  $n_i^{(\pm)}$  corespunde fermionilor, iar semnul de jos corespunde bosonilor.

In limita continua, energiile de cuasi-particula FES sunt

$$\begin{aligned} \tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}} &\equiv \epsilon + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int_{\Omega} d^s \mathbf{r}' \theta[\epsilon + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - V_{\text{ext}}(\mathbf{r}')] \\ &\times \int_0^{\epsilon + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - V_{\text{ext}}(\mathbf{r}')} d\epsilon' \sigma(\mathbf{r}', \epsilon') n(\mathbf{r}', \epsilon') v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \end{aligned} \quad (6)$$

si putem imediat verifica faptul ca

$$E = \int_{\Omega} d^s \mathbf{r}' \int_0^{\infty} \epsilon_{\mathbf{r}} n^{(\pm)}[\mathbf{r}, \epsilon(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}})] \sigma(\mathbf{r}, \tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}}) d\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}} \quad (7)$$

Calculand parametrii FES pentru aceste cuasi-energii si introducandu-i in ecuatiile FES [13] observam ca populatiile de echilibru satisfac un ansatz de tipul celor din FLT,

$$n_i^{(\pm)} = \left[ e^{\beta(\tilde{\epsilon}^L(\mathbf{r}) - \mu)} \pm 1 \right]^{-1}, \quad (8)$$

unde

$$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}}^L(t) = \epsilon + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int_{\Omega} d^s \mathbf{r}' \int_0^{\infty} v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n^{(\pm)}(\mathbf{r}', \epsilon') \sigma(\mathbf{r}', \epsilon') d\epsilon'. \quad (9)$$

sunt energiile de cuasi-particula Landau. Prin urmare, desi ofera o perspectiva noua asupra sistemelor de particule in interactie, FES este echivalenta cu teoria standard a lichidelor Fermi, propusa de Landau.

### 3 Sisteme dezordonate mesoscopice

#### 3.1 Sisteme cu doua nivele in materiale anizotrope – extinderea modelului standard de tunelare

In modelul standard de tunelare (STM), proprietatile sistemelor vitroase sunt datorate unui numar mare de defecte dinamice existente in sistem, fiecare defect dinamic fiind inteles ca un atom, sau un grup de atomi care se misca intr-un potential cu doua minime, ca cel din figura 4. Fiecare astfel de sistem dinamic este descris ca un sistem cu doua nivele (TLS, de la *two-level system*).

Hamiltonianul unui TLS liber este

$$H_{\text{TLS}} = \frac{\Delta}{2} \sigma_z - \frac{\Lambda}{2} \sigma_x \equiv \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Delta & -\Lambda \\ -\Lambda & -\Delta \end{pmatrix} \quad (10)$$

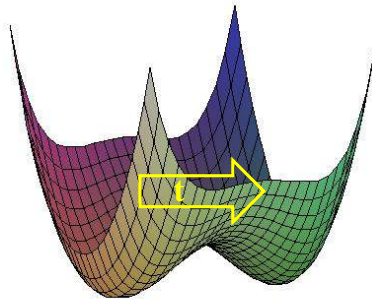


Figure 4: In modelul standard de tunelare, sistemul cu doua nivele este inteles ca un atom sau un grup de atomi se misca intr-un potential efectiv ca cel din aceasta figura. Diferenta dintre energiile starilor fundamentale in cele doua gropi este mult mai mica decat energia de vibratie in gropi;  $\hat{\mathbf{t}}$  este “directia” sistemului cu doua nivele.

unde  $\Lambda$  determina probabilitatea de tunelare dintre cele doua gropi. In general,  $\Delta$  se numeste *asimetria potentialului*, iar  $\Lambda$  se numeste *termen de tunelare*. Interactia dintre TLS si un camp de deformare din solid (cum ar fi campul de deformare al unui fonon) este

$$H_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \delta & 0 \\ 0 & -\delta \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Perturbatia  $\delta$  este liniara in campul de deformare, notat cu  $S_{ij}$ , si in general se scrie ca  $\delta \equiv 2\gamma_{ij}S_{ij}$  (presupunem sumarea dupa indicii care se repeta).

Modelul de interactie (11) este mult prea general pentru a da o descriere a solidelor vitroase mesoscopice, sau anisotrope. Din acest motiv am introdus in Ref. [49] un model mai explicit, in care TLS este descris printr-un tensor simetric  $3 \times 3$ ,  $[T]$ , iar cuplajul dintre  $[T]$  si  $[S]$  este realizat printr-un tensor  $3 \times 3 \times 3 \times 3$  de constante de cuplaj, notat cu  $[[R]]$ :  $\delta = 2[T] : [[R]] : [S]$ , unde “:” reprezina produsul diadic. Relatiile de simetrie ale solidului vitros sunt reflectate in proprietatile tensorului  $[[R]]$  si prin aceasta anisotropia cristalelor vitroase si a cuasicristalelor reiese in mod natural din modelul nostru [51, 52, 55].

### 3.2 Verificarea modelului TLS

Pentru a obtine o intelegere mai profunda a sistemelor cu doua nivele si a interactiei acestora cu fononii si undele acustice, am extins asa numitul “soft potential model” (SPM), care este un model uni-dimensional, la un model tri-dimensional. Interactia acesuia cu undele acustice se face prin deformarea liniara a spatiului, ceea ce rezulta intr-o perturbare a nivelelor de energie. Aceasta perturbare este asimilata intr-un Hamiltonian de interactie cu ajutorul caruia se pot calcula tranzitiile TLSului si ratele de imprastiere a fononilor. In felul acesta am putut observa ca interpretarea STM a acestor interactii trebuie imbunatatita.

### 3.3 Sisteme dezordonate in statistica fractionara

Consideram un sistem unidimensional de fermioni in interactie, cu conditii periodice. Densitatea de stari locala este presupusa independenta de energie,  $\sigma(\mathbf{r}, \epsilon) \equiv \sigma(\mathbf{r})$ , iar interactia dintre particule este data de potentialul Coulombian ecranat,

$$V(r; \gamma, \lambda) = \kappa \frac{\exp(-r/\lambda)}{r^\gamma}, \quad (12)$$

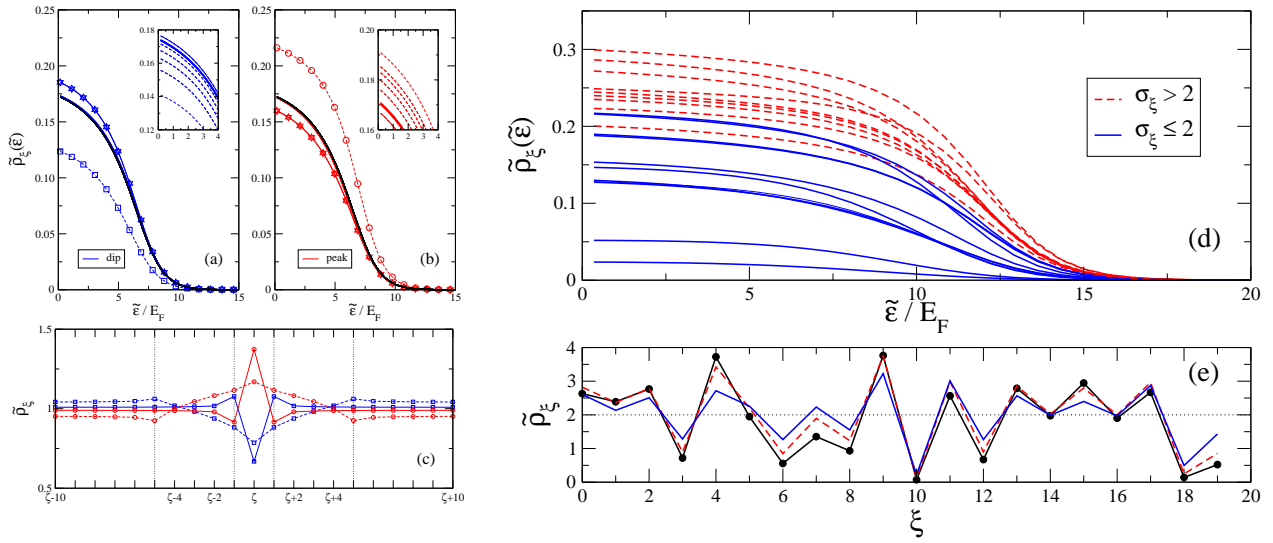


Figure 5: Densitatea de cuasi-particule,  $\tilde{\rho}_\xi(\tilde{\epsilon})$ , pentru sisteme de tip *dip* ( $\sigma_\zeta = 0.5$ ) (a) si *peak* ( $\sigma_\zeta = 2.0$ ) (b). Simbolurile reprezinta densitatea de particule care corespunde speciei  $\zeta$  [patrate(a) si cercuri (b)] si speciilor vecine (triunghiuri). Liniile negre continue corespund unui sistem uniform cu  $\sigma = 1.0$ . In inset sunt reprezentate densitatile de cuasiparticula pentru sisteme de tip dip/peak de largime finita. (c) Densitatea de particule integrata pe energie  $\tilde{\rho}_\xi$ . (d) Densitatea de cuasi-particule pentru un sistem dezordonat ( $\sigma_0 = 2$ ,  $\Delta\sigma = 4$ ). Speciile cu densitate mai mare (albastru), respectiv mai mica (rosu) decat media sunt indicate. (e) Densitatea de stari  $\sigma_\xi$  (negru) si densitatea volumica de particule in fiecaer sub-volum pentru  $T_h = 6.0$  (rosu) si  $T_l = 0.5$  (albastru).

cu  $\gamma = 1$  si  $\lambda = 3R_\xi$  distanta de ecranare, iar  $R_\xi$  este dimensiunea spatiala a speciilor localizate la  $\xi$ . Pentru a inlatura singularitatea in origine, consideram  $V(r) = V(R_0) \equiv V_0$  pentru  $r < R_0 = R_\xi$ . In plus, fixam  $V(R_\xi) = 1$ .

Pentru calcule numerice, impartim spatiul  $\Omega$  in  $N_R = 20$  segmente (“volume”) si axa energetica in  $N_E = 50$  segmente. Avem in total  $N_R \times N_E = 2000$  specii, iar sistemul contine  $N = N_R E_F \sigma$  particule, unde  $E_F = 1$  este energia Fermi. Astfel fixam scala energiei.

Doa exemple transparente de sisteme neomogene sunt obtinute intr-o prima etapa prin cresterea sau scaderea densitatii de stari a unui sistem omogen intr-o singura specie. Concret, alegem un subvolum  $\zeta$  pentru care densitatea de stari este jumatate si, respectiv, dublul valorii de referinta, adica  $\sigma_\xi = 1.0$  pentru orice  $\xi \neq \zeta$  si  $\sigma_\zeta = 0.5$  (cazul “dip”) sau 2.0 (cazul “peak”). Pentru simetrie am ales  $N_R + 1$  sub-volume. In figura (5) sunt reprezentate densitatile de particule pentru cele doua sisteme la temperatura  $T = 1$ . Spre deosebire de cazul sistemului omogen unde avem o functie unica  $n_{\xi_i} \equiv n_i$  pentru toate sub-volumele, acum avem populatii diferite cu o distributie spatiala. Cele doua sisteme au o simetrie in oglinda: densitatea de particule in specia  $\zeta$  scade in cazul *dip* si creste in cazul *peak*, comparativ cu valoarea obtinuta in urma unui calcul mean-field pentru sistemul omogen. Densitatea de particule in sub-volumele vecine,  $\zeta - 1$  and  $\zeta + 1$ , au deviatii contrare valorii din sub-volumul  $\zeta$ . Acest fapt poate fi explicat in modul urmat. La echilibru, in cazul sistemului de tip *dip* interactia repulsiva dintre particule face ca particulele sa se acumuleze catre marginile regiunii cu densitate constanta  $\sigma = 1.0$ , in timp ce in  $\zeta$  numarul de particule este mai scazut. Procesul opus este regasit in cazul sistemului de tip *peak*, unde un numar mai mare de particule prezente in sub-volumul  $\zeta$  vor respinge particulele din speciile adiacente spatial. In cazul sistemelor de tip *dip* sau *peak* cu variatia densitatii de stari pe portiuni finite, se poate observa o distributie mai larga in



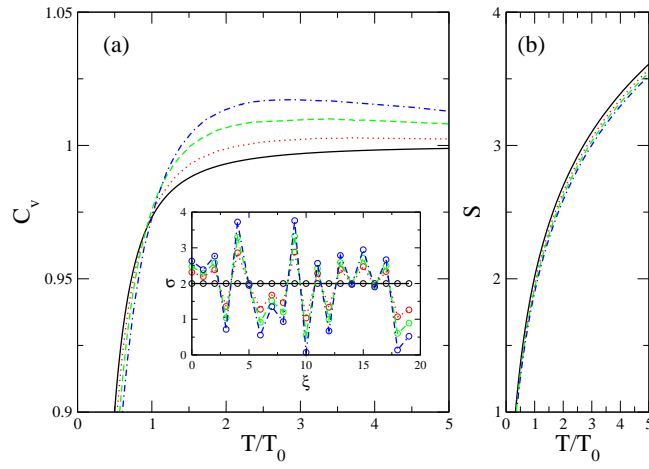


Figure 6: Caldura specifica (a) si entropia (b) pentru diferite grade de dezordine:  $\Delta\sigma = 0$  (negru), 0.5 (rosu), 0.75 (verde) and 1 (albastru), indicate si in inset.

densitatea de particule. Am considerat o variatie liniara,  $\sigma_{\zeta+\tau} = \sigma_{\zeta-\tau} = 0.5 + 0.1\tau$  (dip) si  $\sigma_{\zeta+\tau} = \sigma_{\zeta-\tau} = 2.0 - 0.2\tau$  (peak), cu  $\tau = 1, 2, 3, 4$ . Datorita simetriei, se poate observa ca  $\rho_{\zeta-\tau,i} = \rho_{\zeta+\tau,i}$ , pentru orice  $\tau > 0$ .

In continuare sunt analizate proprietatile unui sistem cu dezordine, definit prin valorile aleatoare ale densitatii de stari locale  $\sigma_{\xi}$ . Mai exact, consideram o distributie de tip treapta cu media  $\sigma_0 = 2$  si diferite grade de dezordine definite de largimea distributiei,  $\Delta\sigma$ . Figura 5(d) indica o distributie tipica a particulelor, obtinuta la temperatura  $T = 1$  si pentru gradul maxim de dezordine,  $\Delta\sigma = 4$ . Similar cu exemplele analizate anterior, se poate observa ca densitatile de particule sunt mai mari in locatiile cu densitate de stari locale mai mare, inasa, in acest caz, obtinem populatii dependente de  $\rho_{\xi}$ . In sub-figura (e) este reprezentata densitatea de stari locale impreuna cu distributiile de particule la fiecare site  $\xi$ , pentru doua temperaturi,  $T_l = 0.5$  si  $T_h = 6$ . Se poate vedea ca pentru temperatura mai mare  $T_h$  distributia de particule urmeaza indeaproape distributia  $\sigma_{\xi}$ , in timp ce pentru temperatura  $T_l$  distributia particulelor este mai uniforma. In limita temperaturilor mari, interactiile devin din ce in ce mai putin importante si toate starile devin echi-probabile. In consecinta, densitatea spatiala de particule  $\rho_{\xi}$  din fiecare sub-volum devine proportionala cu densitatea de stari  $\sigma_{\xi}$ . In mod diferit, in cazul temperaturii joase, interactiile repulsive tind sa echilibreze distributia de particule. La temperaturi intermediare, nu mai exista o relatie transparenta intre densitatea de particule si densitatea de stari, iar distributia de echilibru poate obtinuta in acest caz utilizand formalismul FES.

In evaluarea caldurii specifice in astfel de sisteme dezordonate se observa deviatii fata de sistemele omogene. In cazul densitatii de stari constante, caldura specifica este aceeaasi pentru orice parametru FES diagonal. Aici totusi avem parametrii FES de forma (3), adica diagonali in energie si ne-diagonali in raport cu indicii de pozitie. Rezultatele obtinute sunt prezentate in figura 6(a) pentru diferite distributii ale densitatii locale, indicate in inset, corespunzator valorilor  $\Delta\sigma = 1, 0.75, 0.5\sigma_0$ . Sporind gradul de dezordine, se observa o crestere a deviatii in  $C_v$  comparativ cu sistemul omogen, cu un maxim deasupra unitatii. Deviatii similare sunt observate in dependenta de temperatura a entropiei in Fig. 6(b), care sunt in concordanta cu caldura specifica calculata. Deviatii dispar in limita gradului de dezordine mic sau a temperaturilor mari.

# 4 Studiul modurilor fononice si a sistemelor cu doua nivele in nanostructuri si materiale anizotrope

## 4.1 Moduri fononice in nano-panglica de nitrura de bor (BN)

Legile de dispersie fononice pentru nano-panglica de nitrura de bor (BN) au fost obtinute cu ajutorul pachetului SIESTA [63]. Intr-un prim pas s-a efectuat relaxarea structurii bi-dimensionale infinite, pana cand forte interatomice reziduale au fost mai mici de  $0.001 \text{ eV}/\text{\AA}$  si s-a obtinut constanta de retea  $a = 1.44 \text{ \AA}$ . Astfel s-au generat pozitiile initiale pentru structura tip nano-panglica, care a fost din nou relaxata, acest pas fiind crucial pentru a obtine curbe de dispersie de o buna acuratete. Dupa cum se observa in Fig. 7(a) atomii marginali isi modifica vizibil pozitiile fata de retea hexagonala ideala. Este analizata de asemenea situatia unei nano-panglici in care s-a introdus substitutional un atom de impuritate (atom de mangan) (vezi Fig. 7(b)).

Modurile acustice fononice sunt in numar de patru: doua flexurale, un mod longitudinal si unul torsional. Acestea joaca un rol esential in transportul de caldura la temperaturi joase. In Fig. 8 sunt reprezentate cele patru moduri acustice in punctul  $\Gamma$ , figurand fortele.

In continuare va fi studiata modificarea legilor de dispersie prin introducerea unor impuritati substitutionale. Aceste impuritati deformeaza local structura nano-panglicii de BN, iar in starea fundamentala se vor gasi de o parte sau de alta a retelei hexagonale. Acest ansamblu poate fi privit ca un sistem cu doua nivele intr-o panglica nanoscopica si poate fi studiat prin comparatie, cu ajutorul modelului nostru [49, 50].

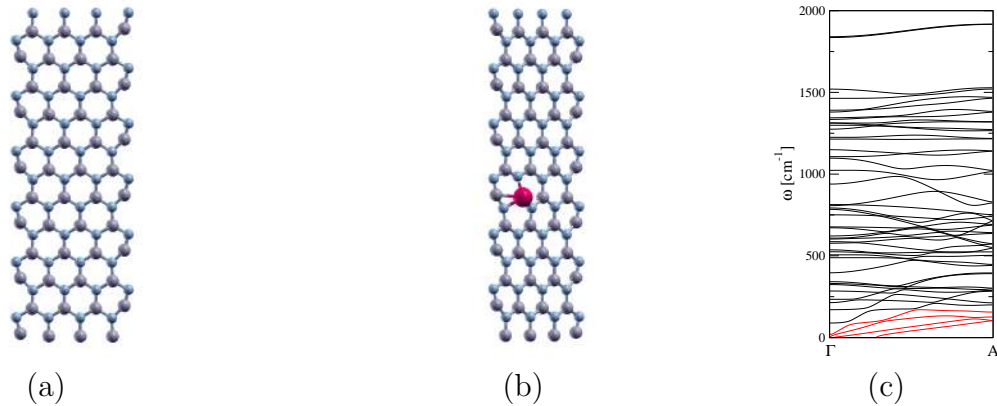


Figure 7: (a) Nano-panglica de nitrura de bor. (b) Nano-panglica cu o impuritate, punandu-se in evidenta deplasarea din planul hexagonal a impuritatii. (c) Legile de dispersie fononice pe directia  $\Gamma - A$  in spatiul reciproc pentru structura ideala. Sunt figurate cu rosu primele patru moduri acustice.

## 4.2 Transport de spin in nanodetectori

In continuare sunt analizate sisteme quasi unu-dimensionale de tip nanopanglica si nanofir din perspectiva transportului de spin. Structurile contin impuritati magnetice care actioneaza generic sub forma unor sisteme cu doua nivele, ce corespund orientarii momentelor magnetice. Sunt investigate o serie de aplicatii care pot servi drept nanodetectori magnetici, termici, precum si rezonatori nano-mecanici.

Sunt considerate sisteme din nitrura de bor si galiu, care fac parte din clasa semiconduc-torilor de banda interzisa mare (4-6 eV). Acestea au avantajul ca isi pastreaza proprietatile semiconductoare chiar si in cazul sistemelor la scara foarte mica. Starile de suprafata ce apar

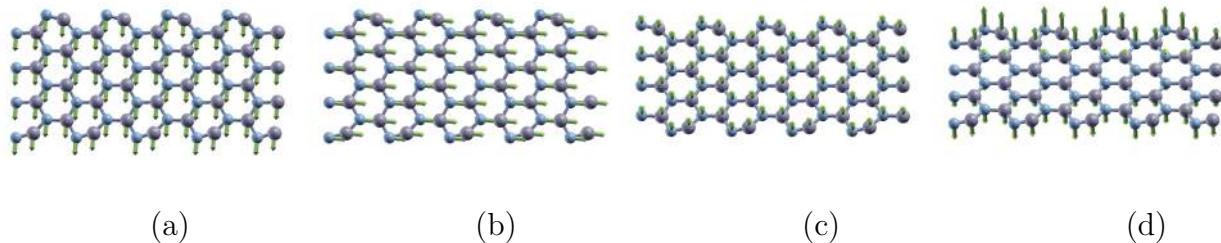


Figure 8: Primele patru moduri acustice reprezentate pentru punctul  $\Gamma$ : modurile flexurale (a) si (c), modul longitudinal (b) si modul torsional (d).

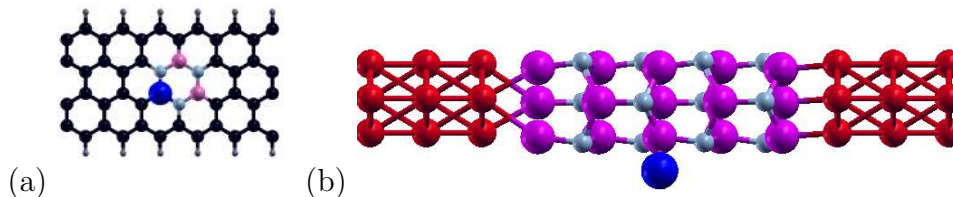


Figure 9: (a) Nanopanglica graphena-nitrura de bor hexagonala, cu o impuritate magnetica; (b) Nanofire de nitrura de aluminiu cu impuritati de mangan aditionale si nanocontacte de aluminiu.

in cazul sistemelor de tip nanopanglica sau nanofir in general reduc considerabil banda interzisa (1-2eV), astfel incat structurile devin interesante pentru analiza de transport. In plus, fiindca este mentinut caracterul de semiconductor prin mentinerea unui gap, pot fi utilizate in dispozitive care se bazeaza pe efectul de camp (e.g. nanotranzistori cu efect de camp). Impuritatile magnetice sunt reprezentate de atomi ai metalelor de tranzitie. Acestea au rolul de a polariza curentul de spin. Starea magnetica a impuritatilor este insa determinata de mediul extern, i.e. campuri magnetice, temperatura, asa incat structurile au capacitatea de a functiona in regim de nanodetectori. Pe langa aceste aplicatii, efectele filtru de spin si realizarea unor semiconductori magnetici diluati de dimensionalitate redusa sunt importante in cadrul mai larg al spintronicii. In continuare sunt enuntate pe scurt rezultate obtinute pentru cele trei tipuri de nanodetectori.

In Ref. [64] au fost analizate sisteme prototipice pentru *nanodetectori magnetici* pe baza de nanopanglici [vezi Fig. 9(a)]. Acestea sunt alcatuite dintr-un mono-strat de nitrura de bor, in care au fost introduse impuritati de mangan. Pentru a asigura functionalitatea nanodetectorului magnetic membrana este conectata la doi electrozi de grafena, in configuratie zig-zag. Sunt analizate structuri cu una sau doua impuritati magnetice. La aplicarea unei tensiuni intre cei doi electrozi se observa o polarizare a curentului de spin, care depinde de locatia atomilor de Mn substituiti, cat si de orientarea momentelor magnetice ale acestora. In acest fel se poate pune in evidenta actiunea un camp magnetic extern. Abordarea se bazeaza pe un calcul atomistic de tip DFT, in care structurile sunt in prealabil relaxate, iar transportul este investigat utilizand formalismul functiilor Green de ne-echilibru. Similar, in Ref. [65] sunt investigate nanofire de nitrura de galiu, avand inserate impuritati magnetice substitutionale. Sunt analizate comparativ diferite situatii in care avem substitutii pe atomi de galiu ai metalelor tranzitionale Cr, Mn, Fe, Co, Ni. Se observa in general o buna separare de spin, indeosebi la atomic cu numar atomic mare.

Proprietatile termoelectrice sunt investigate in sisteme de tip nanofir cu impuritati magnetice aditionale pe suprafata firului [66] [vezi Fig. 9(b)]. Acestea influenteaza starile de suprafata, care asigura conductia electrica, ceea ce conduce concomitent la o crestere a coeficientului See-

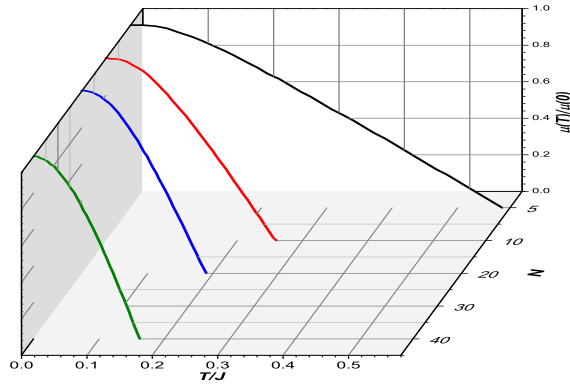


Figure 10: Dependenta de temperatura si dimensiune a unei nanoparticule cubice  $V = N^3$  scufundate (embedded), cuplaj uniform pe suprafata  $h = J$ ,  $S = 1/2$ . In cazul particulei libere temperatura Curie  $T_c$  descreste cu micșorarea lui  $N$ .

beck. Astfel de structuri pot sta la baza *nanodetectorilor termici* utilizand detectia curentului de spin.

In Ref. [67] sunt investigate sisteme quasi uni-dimensionale de tip nanofire de nitrura de aluminiu, care sunt analizate din perspectiva nano-detectorilor mecanici [vezi Fig. 9(b)]. Impuritati de mangan sunt plasate aditional pe suprafata firului. Sunt analizate comparativ doua situatii, ce corespund aplicarii unor tensiuni mecanice. In cazul sistemului netensionat, sistemul se gaseste intr-o faza de tip grafitic, in timp ce, aplicand o forta de tensionare a firului se obtine o configuratie de tip wurtzit. Sunt puse in evidenta diferentele ce apar in structura de benzi corespunzatoare firelor si a influentei impuritatilor magnetice in polarizarea curentului de spin.

## 5 Dependenta magnetizarii nanoparticulelor feromagnetice de dimensiune, forma si cuplajul cu mediul.

Rolul major al formei si dimensiunii structurilor magnetice nanoscopice pentru proprietatile lor deosebite este bine cunoscut si continua a fi studiat in prezent. Mai putin studiată este problema modificării acestor proprietati sub influenta contactului cu mediul, ele fiind deseori considerate ca fiind caracteristici intrinseci, la fel ca si in cazul sistemelor macroscopice. Aceasta problema complicata este desosebit de relevanta pentru structuri de tip senzor. In cercetarea noastra am pornit de la argumentul fizic ca mecanismul dominant prin care se manifesta influenta mediului tine de excitatiile colective (magnoni in cazul dat). Acestea au rolul mediatorului cuplajului de pe suprafata particulei catre starile magnetice interioare. Pe de o parte, datorita coerentei lor magnonii sunt excitatii de raza lunga, deci implica toti spinii pe tot volumul particulei si astfel sunt deosebit de sensibili la starile de pe suprafata acesteia. Pe de alta parte, fiind si excitatii de energie joasa, acestea au o contributie preponderenta la bilantul energetic si termodinamica sistemului.

Aspectul metodologic nou elaborat in cadrul proiectului este abordarea analitica originala a modelului microscopic Heisenberg cu interactie de schimb intre spinii cuantici pe o retea cristalina finita si cuplajul cu mediu sub forma unui camp magnetic pe suprafata cristalului:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \sum_{i \in \text{suprafata}} \mathbf{h}_i \mathbf{S}_i \quad (13)$$

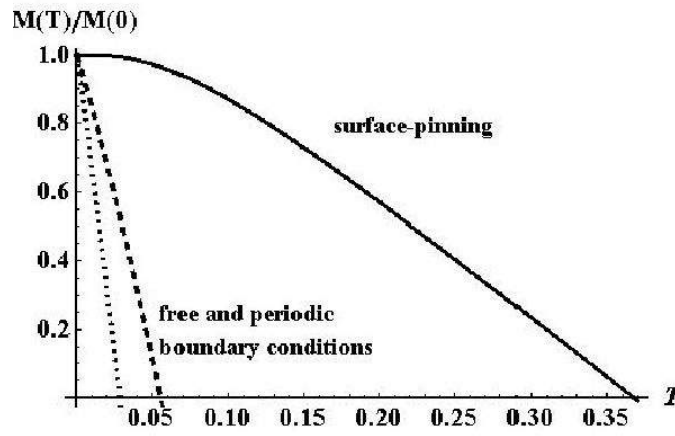


Figure 11: Particula elongata  $N \times N \times L = 5 \times 5 \times 100$ ,  $S = 1/2$  plasata intr-un mediu cu cuplaj magnetic puternic (linie continua), sau particula libera (linie punctata). Solutia pentru conditii ciclice (linie intrerupta) este aprpoiata de limita macroscopica.

Am demonstrat ca la scala nanometrica (sub 50-60 nm) efectele cuantice si caracterul discret al spectrului energetic se manifesta si la temperaturi mari, e.g. de ordinul 100 Kelvin pentru  $Fe$  si oxizi. Aceste efecte sunt neglijate in abordarile cuazi-clasice, e.g. Landau-Lifshitz-Gilbert, utilizate curent. Pe baza metodei propuse am obtinut o generalizare a legii Bloch pentru dependenta de temperatura a magnetizarii,  $\mu(T)$ , in ferromagneti masivi care da o expresie explicita pentru  $\mu(T)$  in functie de forma si dimensiunea nanoparticulei. Trebuie mentionat ca metodele ab-intio se refera la marimi de ordinul sutelor de atomi si ca rezultatele obtinute de noi sunt in bun acord cu simularile numerice de tip Monte-Carlo, care permit tratarea sistemelor cu un numar mai mare de atomi in cluster. Sintetizand rezultatele simularilor numerice, Hendriksen cu coautorii (1994) au propus o parametrizare fenomenologica ( $T \lesssim T_{Curie}/2$ ):

$$\mu(T) = \mu_0 (1 - \gamma T^\alpha), \quad (14)$$

utilizata curent pentru analiza si interpretarea datelor experimentale. Teoria microscopica propusa de noi a permis pentru prima data nu doar obtinerea expresiilor analitice pentru dispersia magnonilor dar si determinarea lui  $\mu(T)$  din calculul statistic cuantic. Prin urmare am putut analiza validitatea Eq. (14). Am considerat cazul particulei rectangulare de forma  $V \propto N_x N_y N_z$  si mai multe situatii relevante din punct de vedere experimental: izotropia si anizotropia formei, diverse conditii la limita (particula libera, particula scufundata (embedded), contact cu mediu pe o portiune de suprafata, magnitudini diverse ale cuplajului, etc.). Ca rezultat am obtinut formule analitice pentru fiecare caz si am putut ajunge la o concluzie generala importanta, care inglobeaza aceasta multitudine de situatii:

$$\mu(T)/\mu(0) = 1 - BT^{3/2} - DT \ln T - CT. \quad (15)$$

Ceficientii  $D$  si  $C$  sunt functii determinate de volum  $V$ , forma  $\{N_x/N_z, N_y/N_z\}$  si conditiile la limita  $\{h_i\}$ , coeficientul  $B$  inasa este chiar constanta din legea Bloch ( $B = \zeta(3/2) S^{-5/2} (4\pi J)^{-3/2}$ ), deci nu depinde de acesti parametri. Rezultaul din Eq. (15) difera radical de expresia din Eq. (14) si prin concluziile fizice. Astfel, din analiza multiplelor simulari numerice pe baza Eq. (14) rezulta efectul inmuierii spectrului magnonic in nanoparticule, deoarece  $\gamma$  creste sistematic, adica se apreciaza ca  $J$  – constanta de cuplaj – scade puternic (de cateva ori) fata de materialul masiv. Aceasta concluzie este invalidata de rezultatul nostru, in care  $J$  ramaine constant, demonstrand astfel ca structura atomica locala nu sufera schimbari majore.

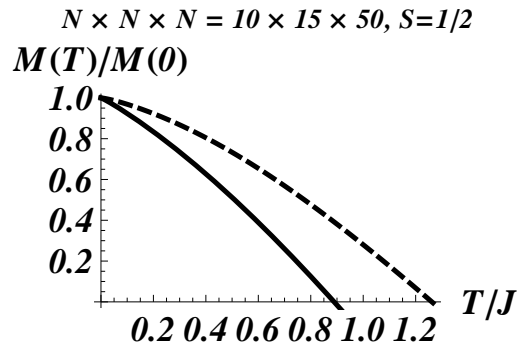
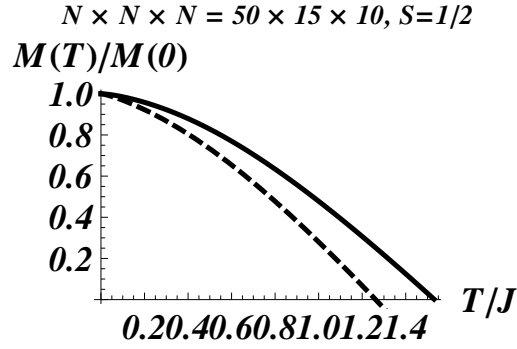


Figure 12: Magnetizarea unei particule anisotrope in dependenta de latura in contact cu mediul (linie contiuana), cuplaj  $h = J/2$  si pentru particula libera (linie intrerupta). Pentru graficul de sus contactul este pe latura maxima, cu  $50 \times 15$  atomi, si pentru graficul de jos contactul este pe latura minima, cu  $10 \times 15$  atomi.

Unul din subiectele de cercetare actuale tine de gasirea mecanismelor de manipulare a magnetizarii. Este bine cunoscut ca magnetizarea scade sistematic cu micșorarea dimensiunii sau sporirea anisotropiei de forma a particulei. Acestea sunt bine reproduse de teoria noastra pentru conditiile libere la limita. Teoria insa prezice o schimbare calitativa a comportamentului  $\mu(T)$  cand exista interactia cu mediul, cand coeficientul  $D$  isi schimba semnul. Un exemplu elocvent este demonstrat in Fig. 10.

Figura 11 ilustreaza accentuarea diferentei intre conditiile la limita pentru structuri anisotrope (nanopillar).

Acest comportament sugereaza posibilitatea de a induce magnetizarea unei particule libere la plasarea acesteia intr-un mediu polarizabil, un efect cu diverse perspective interesante.

Un alt efect interesant rezulta din analiza conditiilor neomogene la limita, cand contactul cu mediu este doar partial si particula respectiva are o forma anisotropa. In acest caz magnetizarea poate aparea sau dispara in dependenta de latura pe care are loc contactul (Fig. 12).

Bineintels ca toate aceste efecte dispar in limita termodinamica ( $D, C \rightarrow 0$ ), insa pentru particule cu dimensiuni 2 – 50 nm efectele devin puternice si pot fi observate experimental si

## 6 Publicatii

1. D. V. Anghel, A.S. Parvan, A.S. Khvorostukhin, *Fractional exclusion statistics applied to relativistic nuclear matter*, Physica A 391, 2313 (2012).
2. D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics – the method to describe interacting particle systems as ideal gases*, Physica Scripta **T151**, 014079 (2012).
3. S. Cojocaru, *Effect of boundary conditions on magnetization of a nano-size ferromagnet*, Romanian Rep. Phys. **64**, S1207 (2012).
4. S. Cojocaru, L. A. Dohotaru and V. A. Moskalenko, *Shape anisotropy and magnetization of ferromagnetic nanostructures*, Journal of Nano- and Optoelectronics **7**, 1 (2012).
5. S. Cojocaru, *Contrasting behavior of free-standing and embedded magnetic nanoparticles*, Romanian Reports in Physics **65**, 832 (2013).
6. S. Cojocaru, L. A. Dohotaru and V. A. Moscalenco, *Phenomenologic versus microscopic description of the nanoparticle magnetization*, Rom. J. Phys. **58**, 955 (2013).
7. Dragos-Victor Anghel, *From Fractional Exclusion Statistics Back to Bose and Fermi Distributions*, Phys. Lett. A **377**, 2922 (2013).
8. G.A. Nemnes, *Spin filtering effects in wurtzite and graphite-like AlN nanowires with Mn impurities*, Journal of Nanomaterials 408475 (2013).
9. G.A. Nemnes and S. Antohe, *Spin filtering in graphene nanoribbons with Mn-doped boron nitride inclusions*, Materials Science and Engineering B (in press, 2013).
10. D. V. Anghel and D. Churochkin, *The anisotropic glassy properties of decagonal quasicrystals*, Advances in Condensed Matter Physics (in press), arXiv:1210.2093.
11. Dragos-Victor Anghel, George Alexandru Nemnes, Francesca Gulminelli, *Equivalence between fractional exclusion statistics and self-consistent mean-field theory in interacting particle systems in any number of dimensions*, Phys. Rev. E (in press), arXiv:1303.5493.
12. G.A. Nemnes and C. Visan, *Ab initio investigation of spin-filter effects in GaN nanowires with transitional metal impurities*, European Physical Journal Plus (in press).
13. D. V. Anghel, *Universal features in the thermodynamics and heat transport by particles of any statistics*, J. Phys.: Conf. Ser. 338, 012002 (2012).
14. D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics: the concept and some applications*, J. Phys.: Conf. Ser. **410**, 012121 (2013).
15. G. A. Nemnes and D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics in systems with localized states*, J. Phys.: Conf. Ser. **410**, 012120 (2013).
16. G.A. Nemnes, C. Visan, T.L. Mitran, A. Nicolaev, L. Ion, S. Antohe, *Enhanced thermopower of GaN nanowires with transitional metal impurities*, MRS Proceedings, 1543 (2013)

17. S. Cojocaru, L. A. Dohotaru and V. A. Moscalenco, *The Effect of Size, Shape and Environment on Magnetic Properties of a Nanoparticle: microscopic model analysis*, Proc. 2nd International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering, Chişinău, Republic of Moldova, April 18-20, 2013, ISBN 978-9975-62-343-8.

## 6.1 Proceedings Editor

Dragos Victor Anghel, Doru Sabin Delion and Gheorghe Sorin Paraoanu, *Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems*, 27 June to 2 July 2011, Constanta, Romania, J. Phys.: Conf. Ser. **410** (2012).

<http://iopscience.iop.org/1742-6596/338/1>

## 7 Alte activitati: prezentari la conferinte, seminarii, etc

- 6.10-6.11.2011: Visit at the BLTP JINR-Dubna, Russia (D. V. Anghel and A. G. Nemnes)
  - 1.11.2011: D. V. Anghel, A model for the dynamic defects in disordered materials, seminar at the BLTP JINR-Dubna, Russia  
<http://theor.jinr.ru/perl-cgi/seminar.pl?2011>
- 23-25.02.2012: Visit at the University of Rhode Island (D. V. Anghel).
  - 24.02.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics vs. Fermi liquid theory – a paradigm shift*, University of Rhode Island (1 h seminar)
- 26.02-4.03.2012: American Physical Society March Meeting, Boston, Massachusetts (D. V. Anghel)
  - 27.02.2012: D. V. Anghel and D. Churochkin, *Amended tunneling model to explain the anisotropy of the glassy properties of crystals and quasicrystals*, APS March Meeting 2012, Boston, Massachusetts (poster).
  - 2.03.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics: the paradigm to describe interacting particle systems*, APS March Meeting 2012, Boston, Massachusetts (oral).
- 23.04-22.05.2012: Visit at the BLTP JINR-Dubna, Russia (D. V. Anghel).
  - 15.05.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics vs. Fermi liquid theory - a paradigm shift*, Bogoliubov Lab of Theor. Phys, JINR-Dubna, Russia (1 h seminar).
- 2-5.07.2012: visit at the Laboratoire de Physique Corpusculaire de CAEN.
  - 3.07.2012: D. V. Anghel, *Fractional Exclusion Statistics for Interacting Particle Systems*, Laboratoire de Physique Corpusculaire de Caen (1 h seminar).
- 9-14.07.2012: Dubna - Nano2012 Conference (D. V. Anghel).
  - 10.07.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics – the paradigm for the description of systems of interacting particles*, Dubna - Nano2012 Conference, Russia (poster).
- 23-27.07.2012: International Conference on Nanoscience + Technology, Paris, France (D. V. Anghel)



- 24.07.2012: D. V. Anghel, *The anisotropy of the glassy properties of crystals and quasicrystals explained in an amended tunneling model*, International Conference on Nanoscience + Technology, Paris, France (poster).
- 24.07.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics versus Fermi liquid theory a paradigm shift*, International Conference on Nanoscience + Technology, Paris, France (poster)
- 12-26.08.2012: I. Dumitru participates in The 22nd Jyväskylä Summer School, Jyväskylä, Finland.
- 19.08-1.09.2012: Visit at the Nanoscience Center, Univ. of Jyväskylä, Finland (D. V. Anghel).
  - 29.08.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics – concept and applications*, Nanoscience Center, Univ. of Jyväskylä, Finland (1 h seminar).
  - 30.08.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics – concept and applications*, Aalto University, O. V. Luonasmaa Lab, Finland (**seminar**).
- 2.09-8.09.2012: D. V. Anghel and G. A. Nemnes participate in the International Conference on Mathematical Modeling in Physical Science, Budapest, Hungary.
  - 6.09.2012: D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics: the concept and some applications*, International Conference on Mathematical Modeling in Physical Science, Budapest, Hungary (lecture);
  - 6.09.2012: G. A. Nemnes, *Fractional exclusion statistics in disordered interacting systems*, International Conference on Mathematical Modeling in Physical Science, Budapest, Hungary (Invited lecture).
- 10-15.09.2012: S. Cojocaru participa la “The 6th Int. Conf. on Materials Science and Condensed Matter Physics”, Vadul-lui-Voda, R. Moldova.
  - 12.09.2012: S. Cojocaru, **Phenomenological versus microscopical description of the nanoparticle magnetization, (oral presentation)**.
- Am editat si publicat proceedingsurile conferintei *Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems*, June 27 -July 2, 2011, Constanta, Romania (<http://iopscience.iop.org/1742-6596/338/1>).
- Am organizat *Mini-Workshop on Nanophysics and Emerging Materials*, 13.09.2012 la care au tinut prezentari **Dr. Konstantin Arutyunov**, de la NanoScience Center, Jyväskylä, Finlanda, **Dr. Alexander Cherny**, de la Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, **Dr. Alexandru Nemnes**, Department of Theoretical Physics, de la IFIN-HH si de la University of Bucharest, Romania, si **Dr. Dragos-Victor Anghel**, de la Department of Theoretical Physics, IFIN-HH.  
Mai multe detalii gasiti la <http://www.theory.nipne.ro/~dragos/MiniNANOEM>
- 21.10-11.11.2012: Visit at the BLTP JINR-Dubna, Russia (D. V. Anghel).
- APS March Meeting, Baltimore, Maryland, 18-22.03.2013 (D. V. Anghel, G. A. Nemnes)
  - **D. V. Anghel**, I. M. Dumitru, A. G. Nemnes, D. V. Churuchkin, *Models of two-levels systems for anisotropic glassy materials* (Oral)
- 25-30.03.2013: Visit at the Cal. State Univ. Fullerton, USA (D. V. Anghel)

- 29.03.2013: D. V. Anghel, *Systems of interacting particles described as ideal gases with fractional exclusion statistics*, (1 h seminar)  
<http://physics.fullerton.edu/department/highlights/345>
- 1-5.04.2013: MRS Spring Meeting, San Francisco, CA (D. V. Anghel, G. A. Nemnes)
  - D. V. Anghel, *Universal heat conductance in any number of dimensions*, MRS Spring Meeting, 1-5.04.2013 (Oral)
  - D. V. Anghel, *Amended tunneling model for mesoscopic systems and anisotropic solids*, MRS Spring Meeting, 1-5.04.2013 (Poster)
- 29.07-3.08.2013: Conferinta Frontiers of Quantum and Mesoscopic Thermodynamics, Praga, Rep. Ceha. (D. V. Anghel)
  - D. V. Anghel, *Fractional exclusion statistics – the method to describe interacting particle systems as ideal gases*, Frontiers of Quantum and Mesoscopic Thermodynamics, 29 July - 3 August 2013, Prague, Czech Republic (Invited talk)
- 18-20.04.2013: International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering: German-Moldovan workshop on Novel Nanomaterials for Electronic, Photonic and Biomedical Applications, Chisinau, Moldova.
  - S. Cojocaru, *The Effect of Size, Shape and Environment on Magnetic Properties of a Nanoparticle: microscopic model analysis* (oral presentation).

## References

- [1] F. D. M. Haldane. *Phys. Rev. Lett.*, 67:937, 1991.
- [2] Y.-S. Wu. *Phys. Rev. Lett.*, 73:922, 1994.
- [3] S.B. Isakov and S. Viefers. *Int. J. Mod. Phys. A*, 12:1895, 1997.
- [4] Dan Liu, Ping Lu, Gerhard Müller, and Michael Karbach. *Phys. Rev. E*, 84:021136, 2011.
- [5] Dan Liu, Jared Vanasse, Gerhard Müller, and Michael Karbach. *Phys. Rev. E*, 85:011144, 2012.
- [6] S. B. Isakov. *Phys. Rev. Lett.*, 73(16):2150, 1994.
- [7] D. Bernard and Y. S. Wu. In M. L. Ge and Y. S. Wu, editors, *New Developments on Integrable Systems and Long-Ranged Interaction Models*, page 10. World Scientific, Singapore, 1995. cond-mat/9404025.
- [8] G. G. Potter, G Müller, and M Karbach. *Phys. Rev. E*, 75:61120, 2007.
- [9] G. G. Potter, G Müller, and M Karbach. *Phys. Rev. E*, 76:61112, 2007.
- [10] D. Sen and R. K. Bhaduri. *Phys. Rev. Lett.*, 74:3912, 1995.
- [11] R. K. Bhaduri, S. M. Reimann, S. Viefers, A. G. Choudhury, and M. K. Srivastava. *J. Phys. B*, 33:3895–3903, 2000.
- [12] T. H. Hansson, J. M. Leinaas, and S. Viefers. *Phys. Rev. Lett.*, 86:2930–2933, 2001.

- [13] D. V. Anghel, G. A. Nemnes, and F. Gulminelli. arXiv:1303.5493, 2013.
- [14] B. Mirza and H. Mohammadzadeh. *Phys. Rev. E*, 78:021127, 2008.
- [15] Behrouz Mirza and Hosein Mohammadzadeh. *Phys. Rev. E*, 80:011132, 2009.
- [16] B. Mirza and H. Mohammadzadeh. Thermodynamic geometry of fractional statistics. *Phys. Rev. E*, 82:031137, 2010.
- [17] Wung-Hong Huang. *Phys. Rev. E*, 51:3729, 1995.
- [18] Wung-Hong Huang. *Phys. Rev. B*, 53:15842, 1996.
- [19] F. Qin and J. Chen. *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 43:055302, 2010.
- [20] F. Qin and J.-s. Chen. *Phys. Rev. E*, 83:021111, 2011.
- [21] Fang Qin and Ji-Sheng Chen. Adiabatic sound velocity and compressibility of a trapped d-dimensional ideal anyon gas. *Phys. Lett. A*, 376:1191, 2012.
- [22] Qin Fang and Chen Ji-Sheng. *Commun. Theor. Phys.*, 58:573, 2012.
- [23] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, N. H. March, and R. Pucci. *Phys. Rev. E*, 76:061123, 2007.
- [24] D. V. Anghel. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 40:F1013, 2007.
- [25] D. V. Anghel. *Phys. Lett. A*, 372:5745, 2008.
- [26] D. V. Anghel. *Phys. Lett. A*, 376:892, 2012.
- [27] D. V. Anghel. *EPL*, 87:60009, 2009. arXiv:0906.4836.
- [28] D. V. Anghel. *Phys. Rev. Lett.*, 104:198901, 2010.
- [29] Yong-Shi Wu. *Phys. Rev. Lett.*, 104:198902, 2010.
- [30] D. V. Anghel. *EPL*, 90:10006, 2010. arXiv:0909.0030.
- [31] D. V. Anghel. *EPL*, 94:60004, 2011.
- [32] D. V. Anghel. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 338:012002, 2012.
- [33] F. C. Auluck and D. S. Kothari. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 42:272, 1946.
- [34] Robert M. May. *Phys. Rev.*, 135:A1515, 1964.
- [35] M. Howard Lee. *Phys. Rev. E*, 55:1518, 1997.
- [36] D. V. Anghel. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 35:7255, 2002.
- [37] D. V. Anghel. *Physica Scripta*, 2012:014079, 2012.
- [38] D. V. Anghel. *J. Phys. Conf. Ser.*, 410:012121, 2013.
- [39] D. V. Anghel, A. S. Parvan, and A. S. Khvorostukhin. *Physica A*, 391:2313, 2012.
- [40] J. D. Walecka. *Annals of Physics*, 83:491, 1974.

- [41] B. D. Serot and J. D. Walecka. *Adv. Nucl. Phys.*, 16:1, 1986.
- [42] G. A. Nemnes and D. V. Anghel. arXiv:1208.3621, 2012.
- [43] G. A. Nemnes and D. V. Anghel. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 410:012120, 2013.
- [44] D. V. Anghel. *Phys. Lett. A*, 377:2922, 2013.
- [45] R. C. Zeller and R. O. Pohl. *Phys. Rev. B*, 4:2029, 1971.
- [46] P. Esquinazi. *Tunneling systems in amorphous and crystalline solids*. Springer, 1998.
- [47] Robert O. Pohl, Xiao Liu, and EunJoo Thompson. *Rev. Mod. Phys.*, 74:991, 2002.
- [48] Michael I. Klinger. *Physics Reports*, 492:111, 2010.
- [49] D. V. Anghel, T. Kühn, Y. M. Galperin, and M. Manninen. *Phys. Rev. B*, 75:064202, 2007.
- [50] T. Kühn, D. V. Anghel, Y. M. Galperin, and M. Manninen. *Phys. Rev. B*, 76:165425, 2007. cond-mat/07051936.
- [51] D. V. Anghel and D. Churochkin. *EPL*, 83:56004, 2008. arXiv:0804.1486.
- [52] D. V. Anghel and D. V. Churochkin. *Phys. Rev. B*, 78:94202, 2008. arXiv:0804.1481.
- [53] D. V. Anghel and D. V. Churochkin. *J. Phys.: Conf. Series*, 150, 2008. arXiv:0809.4660.
- [54] D. V. Anghel. *Rom. J. Phys.*, 54:65, 2009. arXiv:0810.0754.
- [55] D. V. Anghel and D. V. Churochkin. arXiv:1210.2093, to appear in *Adv. Cond. Matt. Phys.*, 2013.
- [56] S. Cojocaru. Effect of boundary conditions on magnetization of a nano-size ferromagnet. *Rom. Rep. Phys.*, 2012.
- [57] S. Cojocaru, L. A. Dohotaru, and V. A. Moskalenko. *J. Nano- and Optoelectronics*, 2012.
- [58] L. G. C. Rego and G. Kirczenow. *Phys. Rev. Lett.*, 81:232, 1998.
- [59] L. G. C. Rego and G. Kirczenow. *Phys. Rev. B*, 59:13080, 1999.
- [60] F. E. Serr and J. D. Walecka. *Phys. Lett. B*, 79:10, 1978.
- [61] B. D. Serot and J. D. Walecka. *Int. J. Mod. Phys.*, 6:515, 1997.
- [62] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, and P. Ring. *Phys. Rep.*, 409:101, 2005.
- [63] J M Soler, E Artacho, J D Gale, A Garcia, J Junquera, P Ordejon, and D Sanchez-Portal. *J. Phys. Cond. Mater.*, 14:2745, 2002.
- [64] G. A. Nemnes and S. Antohe. *Mater. Sci. and Eng. B*, 2013. in press.
- [65] G. A. Nemnes and C. Visan. *Eur. Phys. J. Plus*, 2013. in press.
- [66] G. A. Nemnes, C. Visan, T.L. Mitran, A. Nicolaev, L. Ion, and S. Antohe. *MRS Proceedings*, 1543:1543, 2013.
- [67] G. A. Nemnes. *Journal of Nanomaterials*, 2013:408475, 2013.