

Raport stiintific

*privind implementarea proiectului in perioada ianuarie
– noiembrie 2014*

1 Sisteme cu doua nivele

Am continuat studierea diverselor tipuri de sisteme cu doua nivele si a proprietatilor fizice ale acestora si prin metoda teoriei functionalei de densitate. Consideram un nanodetector in care elementul activ cu doua stari distincte este o molecula de ferrocene, conectata la doi electrozi metalici de dimensiuni nanoscopice. Sistemul este descris in Figura 1.

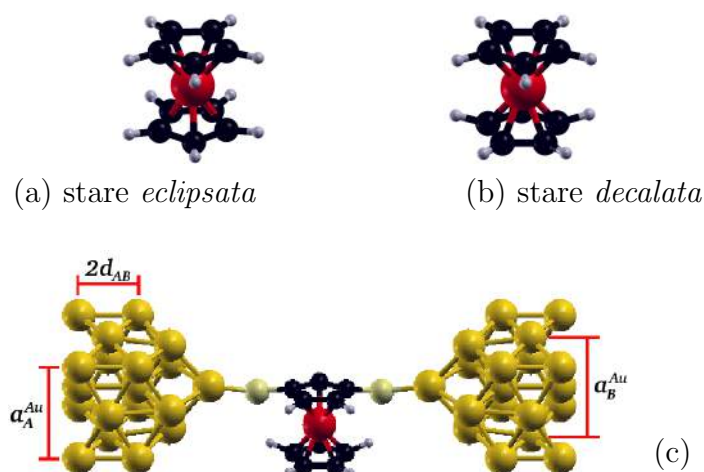


Figure 1: Molecula de ferrocene in starea eclipsata (eclipsed) (a) si decalata (staggered) (b). (c) Electrozii de Au sunt atasati prin intermediul unor atomi de sulf. Sunt indicati parametrii de retea corespunzatori structurii relaxate a electrozilor.

Molecula de ferrocene ale alcatuita din doua inele ciclopentadienil (Cp) conectate de un atom de Fe. Atomii de sulf asigura o legatura chimica puternica intre molecula organica si electrozii de Au. Molecula este conectata astfel incat unul dintre inelele Cp este fixat, in timp ce celalalt se poate roti. In cazul moleculelor izolate, sub influenta agitatiei termice, cele doua inele Cp pot avea o miscare relativa de rotatie. Starea de energie minima este configuratia eclipsata, in timp ce in starea decalata energia se maximizeaza. Intre cele doua configuratii exista o diferenta de energie de $E_b = 20$ meV. Prin urmare, in functie de energia de excitatie E , sistemul poate efectua oscilatii ($E \leq E_b$) sau o miscare de rotatie continua ($E > E_b$).

Vom analiza in continuare caracteristica de transfer a sistemului, care depinde de configuratia moleculei de ferrocene. Pentru a descrie optimizarea structurala, inclusiv cuplajul cu electrozii, este utilizata teoria functionalei de densitate (DFT). Metoda computationala folosita este SIESTA, in care avantajul major consta in utilizarea unui set de baza localizat, ceea ce permite scalarea liniara a timpului de calcul. Este utilizata aproximatia locala a densitatii (LDA) in parametrizarea lui Ceperley si Alder. Relaxarile structurale sunt efectuate folosind o

schema Monkhorst-Pack de tipul $1 \times 1 \times 10$, avand o toleranta pentru fortele reziduale de $0.04 \text{ eV}/\text{\AA}$.

Electrozii nanoscopici sunt alcatuiti printr-o repetitie a planelor de tip A-B pe directia $[001]$ cfc-Au, avand 9 atomi in celula unitate. Ca urmare a procesului de relaxare, structura se contracta in lungul directiei de transport, distanta dintre straturile A si B devenind $d_{AB} = 1.34\text{\AA}$, care este mai mica decat jumatate din constanta de retea corespunzatoare cristalului masiv, $a_0^{Au}/2 = 2.04\text{\AA}$. Aceasta situatie este tipica sistemelor nanoscopice quasi-1D sau clusteri atomici, in care legaturile nesatisfacute in vecinatatea suprafetelor conduc la micșorarea distantelor inter-atomice. Pornind de la aceste date structurale, sistemul total continand electrozii si molecula este optimizat.

Caracteristica de transfer a sistemului este analizata folosind formalismul functiilor Green de ne-echilibru. Functia de transmisie este determinata pentru cele doua configuratii, *eclipsed* si *staggered*, luand in considerare distante diferite intre electrozii L_z (Fig. 2(a)). Micșorand distanta dintre electrozii, cuplajul contact-molecula creste, iar peak-urile observate in transmisie devin mai largi, ceea ce corespunde unui timp de viata mai redus. Modificarile in transmisie corespunzatoare celor doua configuratii sunt continuate in raportul $T^{(s)}/T^{(e)}$, indicat in Fig. 2(b). In vecinatatea nivelului Fermi, functia de transmisie pentru starea decalata este cu aproximativ 20% mai mare decat in cazul starii eclipsate. Rezulta ca este posibila detectia rotirii inelului Cp mobil, rezultata in urma unei perturbatii externe.

Pentru o mai buna caracterizare a efectului de modificare a conductantei in raport cu unghiul de rotatie relativa intre cele doua inele Cp, este efectuat un studiu de dinamica moleculara. Prin variatia energiei cinetice a inelului mobil sunt puse in evidenta doua regimuri de functionare: regim de oscilator si, respectiv, rotatie continua. In primul caz, ($E \leq E_b$), este determinata perioada proprie de oscilatie, iar frecventa corespunzatoare este in intervalul $1 - 1.4 \text{ THz}$, depinzand de energia cinetica a inelului Cp. Cu ajutorul acestui dispozitiv poate fi pusa in evidenta magnitudinea perturbatiei prin modificarea perioadei de oscilatie proprie ($E \leq E_b$) sau a frecventei unghiulare de rotatie ($E > E_b$), ceea ce are consecinte in modificarea conductantei electrice.

Mai multe detalii se pot gasi in lucrarea **Phys. Chem. Chem. Phys.** **16**, 18478 (2014).

2 Aplicatii ale statisticii fractionare de excluziune la fenomene de transport

In ultimele decade, modelele si simulatoarele de tip drift-difuzie au capatat o importanta majora in studiul si caracterizarea dispozitivelor de circuit cu semiconductori. Astfel, au fost dezvoltate scheme eficiente de tip Monte Carlo bazate pe ecuatia de transport Boltzmann. Prin scalarea continua a dispozitivelor efectele cuantice au devenit din ce in ce mai importante, ceea ce a necesitat dezvoltarea unor modele de transport adecvate. Abordarea cuantica microscopica – desi ofera o acuratete sporita in cazul sistemelor mici – devine din ce in ce mai dificil de implementat cand numarul de particule creste. Putem exemplifica aici cu modele de tip diagonalizare exacta sau metoda functionalei de densitate cuplata cu abordarea bazata pe functii Green de ne-echilibru.

Pe de alta parte au fost dezvoltate modele care contin un tratament hibrid de tip microscopic-macroscopic, care combina descrierea microscopica pe unitati de scala mici cu modele de tip fluid macroscopice, spre exemplu: e.g. quantum drift diffusion model (QDD), quantum corrected drift diffusion model (QCDD), Schrödinger-Poisson-Drift-Diffusion model (SPDD).

Utilizand metoda statisticii fractionare de excluziune (FES) propunem un model de tip drift-difuzie in care se incorporeaza in maniera locala proprietatile gazelor cuantice ce corespund sistemelor de particule in interactie. In acest scop, urmarim abordarea elaborata in lucrarea

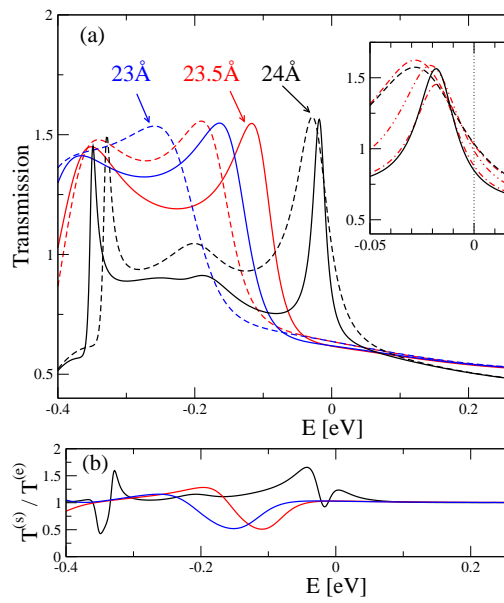


Figure 2: (a) Transmisia ca functie de energie pentru structuri avand diferite distante L_z intre electrozi: 24Å (negru), 23.5Å (rosu), 23Å (albastru) pentru starea eclipsata (linie continua) si starea decalata (linie intrerupta). Insetul contine date similare pentru structuri cu $L_z = 24\text{Å}$, pentru trei unghiuri de rotatie intermediare, $\theta = 8^\circ$ (linie punctat-intrerupta), 16° (linie punctat-punctat-intrerupta), 28° (linie punctat-intrerupta-intrerupta). (b) Raportul functiilor de transmisie corespunzatoare celor doua configuratii, $T^{(s)}/T^{(e)}$.

publicata recent [**Rom. Rep. Phys. 66, 336 (2014)**], prin care extindem conceptul de specie astfel incat includem grade de libertate clasice – pozitiile speciilor in spatiul real – pe langa partajarea uzuala pe axa energiei. Ratele de tranzitie stabilite in [**J. Stat. Mech. P09011 (2010)**] sunt recalulate pentru a include tranzitii intre specii cu coordonate diferite.

Sistemul analizat este un dispozitiv generic alcatuit din zona activa si contacte, in care transportul se desfasoara prin hopping intre stari localizate. Hamiltonianul sistemului este dat de:

$$E = \sum_I \epsilon_{\mathbf{r}_I} n_{\mathbf{r}_I} + \frac{1}{2} \sum_{I,J} V(|\mathbf{r}_I - \mathbf{r}_J|) n_{\mathbf{r}_I} n_{\mathbf{r}_J}, \quad (1)$$

unde $\epsilon_{\mathbf{r}_I}$ este energia si $n_{\mathbf{r}_I}$ numarul de ocupare al site-ului I ; numarul total de particule este $N = \sum_I n_{\mathbf{r}_I}$. Definim energiile de quasiparticula $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_i} = \epsilon_{\mathbf{r}_i} + \sum_{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_j} < \tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_i}} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) n_{\mathbf{r}_j}$, in asa fel incat $E = \sum_I \tilde{\epsilon}_{\mathbf{r}_I} n_{\mathbf{r}_I}$.

Presupunand ca sistemul este in echilibru termic, probabilitatea de a gasi sistemul intr-o stare Υ , definita de ansamblul $\{N_{\xi i}, G_{\xi i}\}_{\xi i}$, este

$$p_{\Upsilon}^{\text{eq}} \equiv p^{\text{eq}}(\{N_{\xi i}, G_{\xi i}\}_{\xi i}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \prod_{(\xi, i)} W_{\xi i} \exp\left(-\frac{E_{\Upsilon}}{k_B T}\right), \quad (2)$$

unde \mathcal{Z} este functia de partitie si $E_{\Upsilon} = \sum_{\xi, i} N_{\xi i} \tilde{\epsilon}_{\xi i}$ este energia totala – presupunem ca toate particulele care apartin unei specii (ξi) au aceeasi energie de quasiparticula $\tilde{\epsilon}_{\xi i}$. Doua stari ale sistemului FES, Υ and Φ , sunt considerate vecine daca difera printr-un singur salt al unei particule din specia (ξ, i) catre specia (η, j) ,

$$\Upsilon = \{N_{\xi i}, G_{\xi i}; N_{\eta j}, G_{\eta j}; \{N_{\zeta k}, G_{\zeta k}\}\} \quad (3)$$

$$\Phi = \{N_{\xi i} - 1, G'_{\xi i}; N_{\eta j} + 1, G'_{\eta j}; \{N_{\zeta k}, G'_{\zeta k}\}\}, \quad (4)$$

(unde $(\zeta, k) \neq (\xi, i), (\eta, j)$). Prin extragerea unei particule din specia (ξ, i) si inserarea intr-o specie (η, j) , numarul de stari disponibile se poate schimba in orice alta specie (ζk) in $G'_{\zeta k} =$

$G_{\zeta k} + \alpha_{\zeta k, \xi i} - \alpha_{\zeta k, \eta j}$. Introducand un lant Markov reversibil se poate invoca ecuatia de balanta detaliata,

$$p_{\Upsilon}^{\text{eq}} \Gamma_{\Phi \Upsilon} = p_{\Phi}^{\text{eq}} \Gamma_{\Upsilon \Phi}, \quad (5)$$

unde $\Gamma_{\Phi \Upsilon}$, $\Gamma_{\Upsilon \Phi}$ sunt ratele de tranzitie de la Υ la Φ si invers, respectiv. Din ecuatia de balanta detaliata obtinem raportul intre ratele de tranzitie

$$\log \left(\frac{\Gamma_{\Upsilon \Phi}}{\Gamma_{\Phi \Upsilon}} \right) = \log(p_{\Upsilon}^{\text{eq}}) - \log(p_{\Phi}^{\text{eq}}) \simeq \frac{\partial(\log p_{\Upsilon}^{\text{eq}})}{\partial N_{\xi i}} - \frac{\partial(\log p_{\Upsilon}^{\text{eq}})}{\partial N_{\eta j}}, \quad (6)$$

unde, in ultima etapa de calcul, am folosit o dezvoltare in primul ordin pentru $\log(p_{\Phi}^{\text{eq}})$ in jurul lui Υ . In limita termodinamica, adica pentru $N_{\xi i}$ si $G_{\xi i}$ mari, aplicam formula Stirling pentru a calcula $\log(p_{\Upsilon}^{\text{eq}}) \simeq \sum_{(\xi, i)} [(G_{\xi i} + N_{\xi i}) \log(G_{\xi i} + N_{\xi i}) - G_{\xi i} \log G_{\xi i} - N_{\xi i} \log N_{\xi i}]$ si, folosind identitatea $\alpha_{\xi i, \eta j} = -\partial G_{\eta j} / \partial N_{\xi i}$ gasim

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\log p_{\Upsilon}^{\text{eq}})}{\partial N_{\xi i}} &= (1 - \alpha_{\xi i, \xi i}) \log(G_{\xi i} + N_{\xi i}) - \log N_{\xi i} + \alpha_{\xi i, \xi i} \log G_{\xi i} \\ &- \alpha_{\xi i, \eta j} \log(G_{\xi i} + N_{\xi i}) + \alpha_{\xi i, \eta j} \log G_{\eta j} \\ &+ \sum_{(\zeta, k)} [-\alpha_{\xi i, \zeta k} \log(G_{\zeta k} + N_{\zeta k}) + \alpha_{\xi i, \zeta k} \log G_{\zeta k}], \end{aligned} \quad (7)$$

unde $(\zeta, k) \neq (\xi, i), (\eta, j)$ si o expresie similara pentru $\partial(\log p_{\Upsilon}^{\text{eq}}) / \partial N_{\eta j}$ prin interschimbarea (ξ, i) cu (η, j) . Definim numarul de stari disponibile in absenta particulelor [2] prin $G_{\xi i}^0 = G_{\xi i} + \sum_{\eta, j} \alpha_{\xi i, \eta j} (N_{\eta j} - \delta_{\xi i, \eta j})$ si numerele de ocupare prin $n_{\xi i} = N_{\xi i} / G_{\xi i}^0$, din Eq. (6) si gasim rata de tranzitie pentru procesul $\Upsilon \rightarrow \Phi$

$$\Gamma_{\Phi \Upsilon} \sim n_{\xi i} (1 + n_{\eta j} - A_{\eta j}) \prod_{(\zeta, k)} [1 + n_{\zeta k} - A_{\zeta k}]^{-\alpha_{\eta j, \zeta k}} \prod_{(\zeta, k)} [1 - A_{\zeta k}]^{\alpha_{\eta j, \zeta k}}, \quad (8)$$

unde $A_{\xi i} = \sum_{\eta, j} \alpha_{\xi i, \eta j} n_{\eta j}$. Se poate observa ca in cazul unui sistem omogen cu parametrii statistici diagonali, $\alpha_{\xi i, \eta j} = \alpha \delta_{\xi \eta} \delta_{ij}$, se recupereaza ratele de tranzitie indicate in [J. Stat. Mech. P09011 (2010)]:

$$\Gamma_{\Phi \Upsilon}(\alpha) \sim n_{\xi i} (1 - \alpha n_{\eta j})^{\alpha} [1 + (1 - \alpha) n_{\eta j}]^{1 - \alpha}. \quad (9)$$

Ratele de tranzitie in ecuatia (8) reprezinta probabilitate de *salt*, adica probabilitatea pentru ca o particula din specia (ξ, i) sa efectueze un salt in specia (η, j) . Odata ce specia de destinatie este stabilita, mutarea este *acceptata* cu o probabilitate proportionala cu factorul Boltzmann, adica $\sim \min[1, \exp(-(E_{\Phi} - E_{\Upsilon}) / k_B T)]$. Probabilitatea de salt depinde de ocuparile speciilor sursa si tinta si poate fi asociata unui proces de difuzie. Probabilitatea de acceptare depinde de diferenta de energie intre cele doua specii, in cazul campurilor externe fiind influentata de acestea, si poate fi asociata cu un proces de drift.

Aplicam modelul de tip drift-difuzie cu statistica fractionara de excludiune pe un sistem 1-dimensional cu interactii Coulombiene ecranate, parametrizat de:

$$V(r, \lambda) = V_0 \frac{1}{r/R_0} \exp \left(-\frac{r/R_0 - 1}{\lambda/R_0} \right), \quad (10)$$

unde r este distanta dintre particule, R_0 este raza de cut-off care elimina singularitatea in origine, $V_0 \equiv V(R_0, \lambda)$ si λ este lungimea de ecranare. Presupunem ca interactia in contacte este puternic ecranata, $\lambda_C = L_x / N_x$, in timp ce in regiunea activa consideram cele cazuri limita, corespunzatoare lungimilor de ecranare mici, $\lambda_{AR} = \lambda_C$, si foarte mari, $\lambda_{AR} \rightarrow \infty$.

Rezultatele sunt indicate in Fig. 3. In cazul sistemului omogen, $\lambda_{AR} = \lambda_C$, se obtine o variatie liniara in densitatea de particule, de la contactul din dreapta catre contactul din stanga. In cazul sistemului cu interactie, in zona activa densitatea de particule este comparativ mai scazuta in raport cu cele doua contacte. De asemenea, Fig. 3(c,d) indica populatiile in cateva specii relevante, in concordanta cu densitatile de particule determinate.

Modelul de tip drift-difuzie propus are avantajul descrierii sistemului cu interactie in maniera locala sub forma de gaze FES ideale. Aceasta permite abordarea unor sisteme cu numar mare de particule, in care aplicarea modelelor cuantice nu este fezabila.

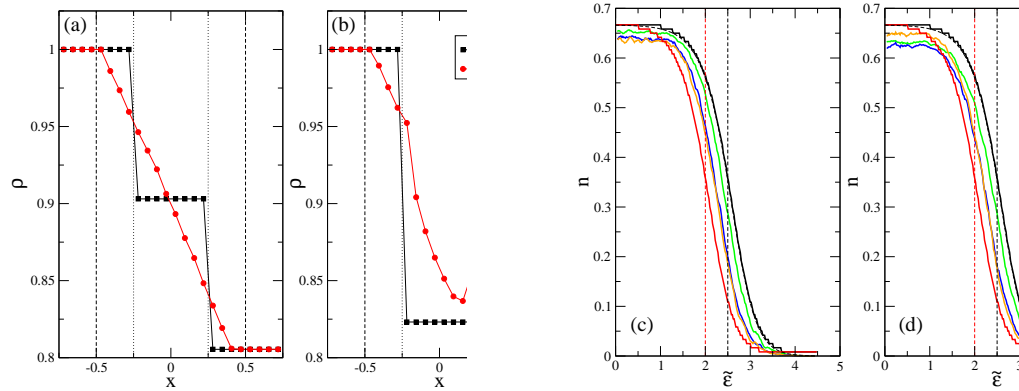


Figure 3: (a) si (b) Densitatea de particule in dispozitiv, pentru $\lambda_{AR} = \lambda_C$ si $\lambda_{AR} \rightarrow \infty$. Linile intrerupte delimiteaza sistemul cu N_x site-uri, iar liniile punctate indica interfata dintre contacte si regiunea activa. Sunt reprezentate densitatile de particule initiale (patrate) si finale (cercuri). (c) si (d) Populatii ca functie de energie pentru contactul din stanga (n_L), pentru cel din dreapta (n_R) si pentru trei alte site-uri, $\xi = 5, 10, 11$, pentru cele doua lungimi de ecranare considerate. Liniile verticale intrerupte indica cele doua potentiale chimice.

Mai multe detalii se pot gasi in lucrarea **Physica Scripta, accepted (2015)**.

3 Studiul modurilor fononice in sisteme de tip nanopanglica

Una din componentele esentiale ale nanodectorilor de radiatie este membrana de dimensiuni nanometrice, in care modurile fononice joaca un rol esential in detectia radiatiei incidente.

Consideram membrane constituite din alotropi ai grafenei. Acestia poseda diferente structurale in raport cu grafena standard, ceea ce conduce la proprietati electrice si termice deosebite.

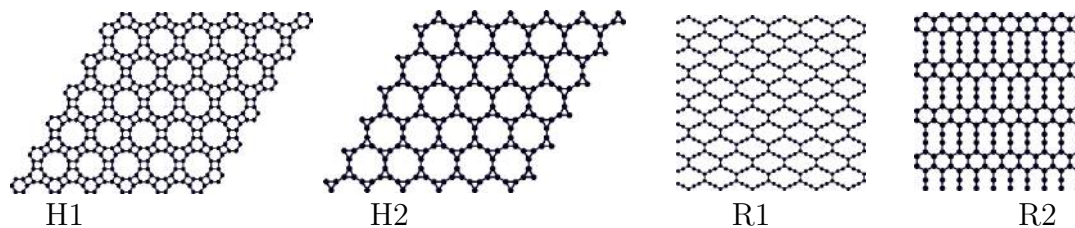


Figure 4: Alotropi ai grafenei: structuri hexagonale (H1,H2) si rectangulare (R1,R2).

Sunt selectati 4 alotropi ai grafenei dintre care doi cu structura hexagonala (H1,H2) si doi cu structura rectangulara (R1,R2). Cu ajutorul calculului de tip DFT, sunt calculate structurile de benzi electronice (Fig. 5) si fononice (Fig. 6). In acest scop, este utilizat pachetul SIESTA, lucrând in aproximatia locala a densitatii (LDA). Structurile sunt in prealabil relaxate cu o

mare acuratete – fortele reziduale sub $0.001 \text{ eV} / \text{\AA}$ – ceea ce este esential pentru a obtine spectrele fononice. Pentru integrarea in zona Brillouin este folosita o schema Monkhorst-Pack de tipul $5 \times 5 \times 1$ pentru sistemele planare infinite.

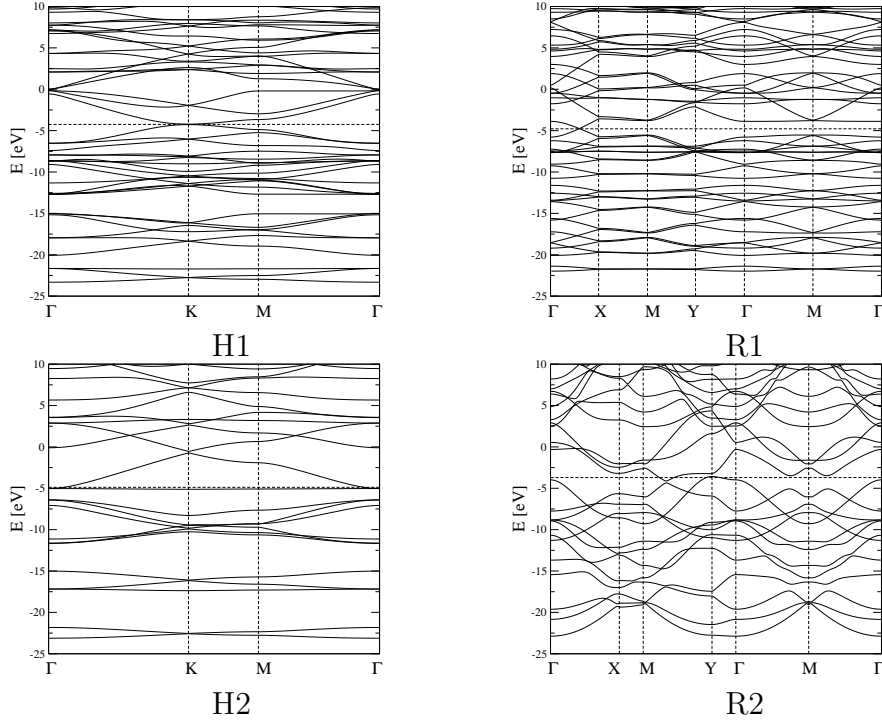


Figure 5: Structuri de benzi electronice.

Structurile de benzi electronice prezentate in Fig. 5 indica densitati de stari diferite, care implica proprietati de conductie specifice in jurul nivelului Fermi, E_F . Spre exemplu structurile H1 si R2 au un numar relativ mare de stari la E_F , ceea ce asigura o buna conductivitate, spre deosebire de sistemul R1 care indica aparitia unui pseudogap. In cazul sistemului H2 nivelul Fermi traverseaza un peak ingust dar proeminent in densitatea de stari, observandu-se totodata o structura cu gap-uri semnificative in benzile inferioare.

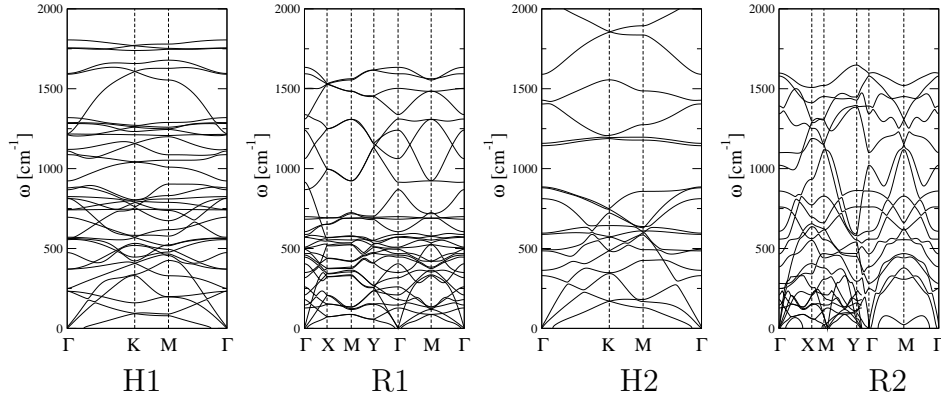


Figure 6: Structuri de benzi fononice.

Structurile de benzi fononice reprezentate in Fig. 6 reflecta cele doua tipuri de simetrii, hexagonala – similar grafenei standard – si rectangulara. O diferenta majora observata intre structurile H1 si H2 consta in aparitia unui gap in intervalul $800 - 1000 \text{ cm}^{-1}$, ceea ce influenteaza transportul termic in acest domeniu energetic.

Sunt analizate in continuare structuri de tip nano-panglica, pentru care sunt reprezentate in Fig. 7 functiile de transmisie electronica si fononica. Se observa ca in cazul acestor sisteme

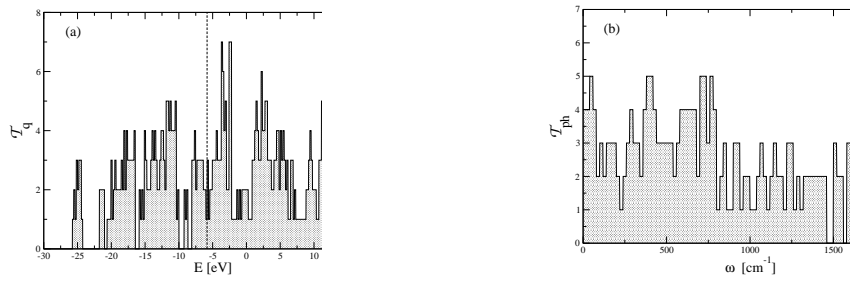


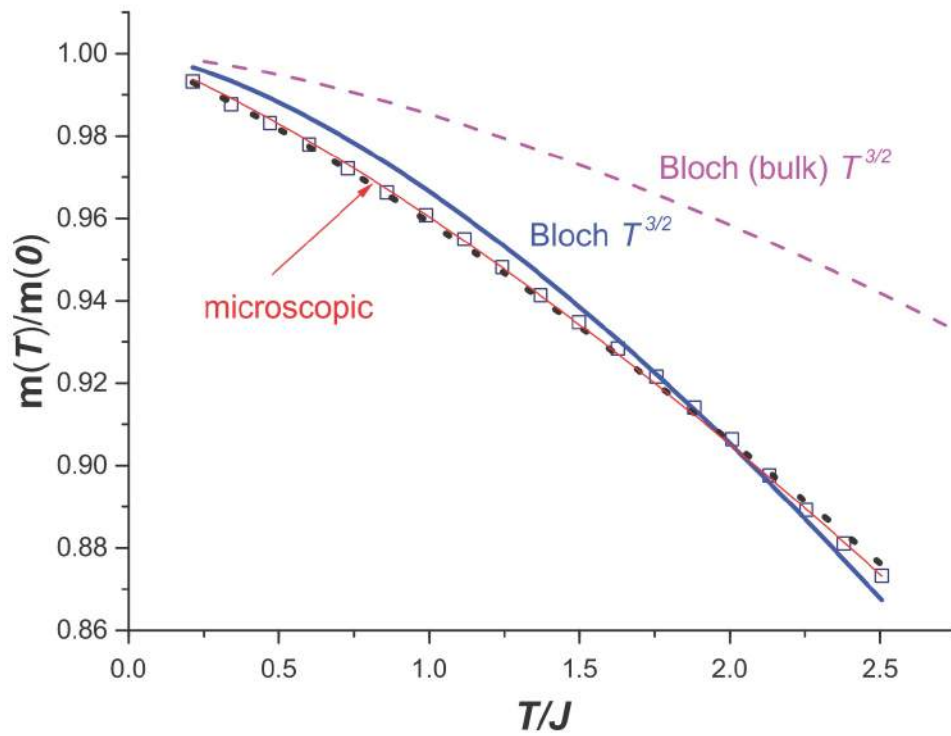
Figure 7: Functiile de transmisie electronica (a) si fononica (b) pentru nanopanglica de tip H1.

quasi 1D, numarul de moduri acustice este 4, spre deosebire de sistemele planare infinite: doua moduri flexurale, unul compresiv si unul torsional. Pe baza functiilor de transmisie se poate analiza transferul de caldura separand contributia electronica de cea fononica. Rezultatele mentionate sunt in curs de prelucrare si urmeaza a fi trimise spre publicare.

4 Studiul unor mecanisme noi de control al magnetizarii nanostructurilor feromagnetice

Teoria bazata pe o metoda microscopica originala de descriere a termodinamicii statistice a nanostructurilor feromagnetice, propusa si dezvoltata in fazele precedente ale proiectului, a fost elaborata cantitativ in perspectiva posibilelor aplicatii pentru sensori magnetici, elemente magnetice de citire "reading HDD heads", medicina si altele. Au fost scoase in evidenta mai multe efecte de interes pentru controlul magnetizarii in nanoparticule magnetice. De exemplu, este stiut ca magnetizarea nanoparticulelor libere (NPL) este inferioara cristalului masiv (nano versus macro). Cauza fizica tine de fluctuatiile sporite ale spinilor de pe suprafata NPL, rezultand o polarizare totala (nucleu + suprafata) minima, in descrestere pentru dimensiuni mai mici. Dimpotriva, rezultatele teoretice demonstreaza ca situatia poate fi inversata pentru NP in contact cu un mediu polarizabil, magnetizarea atingand valori superioare cristalului masiv. De exemplu, la o temperatura data o NPL nepolarizata se poate polariza spontan la valori apropiate de saturatie, daca este inserata intr-un mediu respectiv (fluxul sanguin, e.g.). Pentru anumite conditii, aparent contraintuitiv, contactul cu mediul poate cauza reducerea valorilor magnetizarii sub cea a NPL. Mecanismul respectiv tine de efectul conditiilor la suprafata NP asupra excitatiilor magnetice colective, care implica toti spinii sistemului si, totodata, domina zona excitatiilor de energie joasa. In acest caz suprimarea mai puternica a magnetizarii (sporirea fluctuatiilor) este indusa de asimetria geometrica a cristalului si amplificata de aplicarea asimetrica a cuplajului cu mediul.

In plan teoretic, valabilitatea teoriei noastre a fost demonstrata prin comparare cu rezultatele simularilor numerice pentru modelul Heisenberg cu interactie de schimb J intre spini S (metodele Quantum Monte-Carlo si diagonalizare numerica) pentru clusteri de ioni magnetici cu diferite structuri cristaline. Astfel, a fost examinata dependentia magnetizarii de temperatura (T) pe un interval $T \downarrow TC/2$ care include si temperatura de blocare magnetica T_B . Interactia de schimb fiind un parametru fixat de model, descrierile teoretice se pot evalua dupa conformitatea valorilor rezultate din analizele corespunzatoare. In Fig. 4 avem datele QMC (H.Z. Chen et al., 2009) pentru cluster cu 2124 atomi $S=1$, retea FCC. Valoarea parametrului $B = J - 1.5$ fixata de model este 0.015, aceasta coincide cu solutia noastra analitica (linia rosu continuu). Formula de fitare propusa de noi pentru analize experimentale da $B=0.017$ (punctata). Formula de fitare Bloch (albastru): $B(\text{nucleu})=0.047$, $B(\text{suprafata})=0.025$, $B(\text{total})=0.034$. Formula de baza utilizata in prezent (Hendriksen et al.), $B=0.04$. Este clar ca teoriile utilizate in prezent pentru analiza magnetizarii in nanostructuri, in ciuda bunei performante la fitare, nu pot fi justificate



din punctul de vedere al teoriei microscopice si conduc la concluzii fizice calitativ eronate, e.g. slabirea puternica a cuplajului magnetic in nanostructuri (o opinie larg raspandita in prezent).

Cazul studiat in proiect se refera la materiale magnetice moi (soft) cu anisotropie magnetica slaba, e.g. permalloy, Ni, Fe, oxizi etc. Pentru aplicatii prezinta interes (e.g., medii de stocare, susre de campuri puternice) si materialele magnetice tari, e.g. Co si aliaje, in care anisotropia magnetica se doreste a fi cat mai mare. Acest factor determina o modificare calitativa a spectrelor de excitatii magnetice chiar si in cazul nanoparticulelor de un singur domeniu (monodomain). Am initiat cercetarile in aceasta directie, obiectivul de viitor fiind obtinerea spectrelor (energii si functii de unda) de excitatii colective si mediilor statistice cuantice pe baza metodei mentionate. Mai multe detalii se pot gasi in lucrarea **EPL 106, 17001 (2014)**.

O alta directie de cercetare initiata in ultimul an este descrierea excitatiilor colective ale retelei cristaline in nanostructuri, dincolo de termenii de aplicabilitate a teoriei elasticitatii, inclusiv transportul de caldura de catre fononi.

5 Publicatii 2014

1. G. A. Nemnes and D. V. Anghel, "Fractional exclusion statistics in disordered interacting particle systems", Rom. Rep. Phys. 66, 336 (2014)
2. G. A. Nemnes and Adela Nicolaev, "Transport in ferrocene single molecules for terahertz applications", Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 18478 (2014)
3. S. Cojocaru, A. Naddeo and R. Citro, "Modification of the Bloch law in ferromagnetic nanostructures," EPL **106** 17001 (2014),
doi: 10.1209/0295-5075/106/17001
4. G. A. Nemnes and D. V. Anghel, "A drift-diffusion model based on the fractional exclusion statistics," accepted in Physica Scripta.
5. G. A. Nemnes and D. V. Anghel, "GLASSY BEHAVIOR OF DISORDERED FRACTIONAL EXCLUSION STATISTICS SYSTEMS," submitted to Rom. J. Phys.

6 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, care vor aparea in Rom. J. Phys. (2015). Mai multe detalii gasiti pe situl conferintei <http://www.theory.nipne.ro/Brasov-Meso2014/>.
- Membrii grupului nostru reprezinta IFIN si Univ. Bucuresti (Facultatea de Fizica, prin Dr. G. A. Nemnes) in Reteaua South Europe Research Infrastructure on NanoScience and NanoTechnology (SERINA).

7 Conference presentations

- S. Cojocaru, "A Microscopic Description Of Surface, Size And Shape Effects On Magnetic Properties Of Nanoparticles And Nanoclusters," Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems II, September 1 - 5, 2014, Brasov, Romania, *Invited talk*.
- S. Cojocaru, "Some Mechanisms Relevant For The Control Of Magnetization In Ferromagnetic Nanoparticles," 7 th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics (MSCMP 2014), 16–19 September 2014, Chisinau, R.Moldova, *Invited talk*.
- G. A. Nemnes, "Monte Carlo approach to fractional exclusion statistics and applications", Advanced many-body and statistical methods in mesoscopic systems II, September 1 - 5, 2014, Brasov, Romania, *Oral presentation*.
- G. A. Nemnes, "Monte Carlo simulations for transport modeling using fractional exclusion statistics", IBWAP 2014, 2-4.07.2014, *Oral presentation*.
- D. V. Anghel, "Thermal properties of nanoscopic detectors", IBWAP 2014, 2-4.07.2014, *Poster*.

- D. V. Anghel, a tinut o *serie de 5 cursuri* (a cate 2 ore) legate de Fizica sistemelor mesoscopice la Universitatea Ferdowsi, Mashhad, Iran, la Scoala “Hydrogen, Renewable Energy, Nanotechnology Applications. Physics of Mesoscopic systems,” organizata in perioada 17-19.06.2014. <http://hrenams.um.ac.ir/index.php?&newlang=eng>
- D. V. Anghel, “An introduction to fractional exclusion statistics: thermodynamics and transport”, conferinta Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-mechanical properties and structure (CMSMS 14), 29.09-3.10.2014, Dubna, Russia, *Invited lecture* <http://cmsms.jinr.ru/2014/index.php>

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. Nemes, 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*, in press, <http://dx.doi.org/10.1016/j.mseb.2013.04.014>, 2013.
- [65] G. A. Nemnes and C. Visan, *Eur. Phys. J. Plus*, accepted, 2013.
- [66] G.A. Nemnes, C. Visan, T.L. Mitran, A. Nicolaev, L. Ion, S. Antohe, *MRS Proceedings*, 1543, 2013.
- [67] G. A. Nemnes, *Journal of Nanomaterials* 408475, 2013.

Magurele, 20.11.2014

Director Proiect,
Dr. Dragos-Victor Anghel