

**UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA**

Cu titlu de manuscris

C.Z.U.: [53:004.004+005.53](043.2)

**CIOBU VICTOR**

**MODELAREA ADAPTIV-PARAMETRICĂ  
A UNOR SISTEME FIZICE COMPLEXE**

**131.04 - FIZICĂ COMPUTAȚIONALĂ  
ȘI MODELAREA PROCESELOR**

Autoreferatul tezei de doctor în științe fizice

CHIȘINĂU, 2016

Teză a fost elaborată la Catedra Fizica Teoretică „Iu. Perlin”, Universitatea de Stat din Moldova

**Conducător științific în perioada 2014–prezent:**

PALADI Florentin doctor habilitat în științe fizico-matematice, conferențiar universitar, specialitățile 01.04.02 – Fizică teoretică și matematică, 01.05.04 – Modelare matematică, metode matematice, produse program

**Consultant științific:** doctor în tehnică, profesor universitar, specialitatea 01.05.01 – Bazele teoretice ale informaticii; programarea calculatoarelor  
CĂPĂȚĂNĂ Gheorghe

**Conducător științific în perioada 1994–1998:**

ENACHI Viorel (1944-2013) doctor în științe fizico-matematice, conferențiar universitar

**Referenți oficiali:**

GERU Ion doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, membru corespondent al AȘM, Institutul de Chimie al AȘM

GUDYMA Iurii doctor în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea Națională „Yuriy Fedkovych” din Cernăuți, Ucraina

**Membri ai Consiliului științific specializat:**

CASIAN Anatolie *președinte al Consiliului științific specializat (CȘS)*, doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea Tehnică a Moldovei

NICA Denis *secretar științific al CȘS*, doctor habilitat în științe fizice, conferențiar cercetător, Universitatea de Stat din Moldova

CLOCHIȘNER Sofia *membru al CȘS*, doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor cercetător, Institutul de Fizică Aplicată al AȘM

BARSUC Alexandru *membru al CȘS*, doctor habilitat în științe fizico-matematice, conferențiar universitar, Universitatea de Stat din Moldova

BOLDÎREV Serghei *membru al CȘS*, doctor în științe fizico-matematice, conferențiar cercetător, Universitatea de Stat din Moldova

BALMUȘ Nicolae *membru al CȘS*, doctor în științe fizico-matematice, conferențiar universitar, Universitatea Pedagogică de Stat „Ion Creangă”

DIUDEA Mircea Vasile *membru al CȘS*, doctor în chimie, profesor universitar, Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj-Napoca, România

Susținerea va avea loc la 18 ianuarie 2017, ora 15:00, în ședința Consiliului științific specializat D 30.131.04-03 din cadrul Universității de Stat din Moldova, mun. Chișinău MD-2009, str. A.Mateevici 60, blocul IV, aula 222.

Teza de doctor și autoreferatul pot fi consultate în Biblioteca Universității de Stat din Moldova (str. A.Mateevici 60, Chișinău MD-2009) și pe pagina web a CNAA (<http://www.cnaa.md>).

Autoreferatul a fost expediat la 16 decembrie 2016.

Secretar științific al Consiliului științific specializat  
NICA Denis, dr. hab., conf. cercet.



Conducător științific  
PALADI Florentin, dr. hab., conf. univ.



Autor  
CIOBU Victor



## REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

**Actualitatea temei investigate.** Scopul urmărit de cercetarea aplicativă din științele naturale și ingineresti, care este inter- sau pluridisciplinară, rezidă în dezvoltarea de noi aplicații software în activitatea umană, pe baza cunoașterii științifice din cercetarea fundamentală [1–4]. Modelarea proceselor permite și stabilirea relațiilor de proiectare a sistemelor complexe și a diverselor tehnologii. În teză autorul și-a propus să contribuie la dezvoltarea unor aspecte teoretice și aplicative de modelare a proceselor fizice pe calculator prin elaborarea aplicației adaptive pentru asistența rezolvării problemelor din două domenii de cercetare. Întru realizarea acestui obiectiv a fost efectuată o analiză a experienței acumulate în domeniul dezvoltării aplicațiilor adaptive (AA) și sistemelor suport de decizie (SSD) [5], urmând a fi formulate propuneri de elaborare a aplicațiilor adaptiv-parametrice (AAP) în fizica teoretică. Aplicația adaptivă dezvoltată a fost utilizată pentru determinarea stărilor vibraționale ale moleculei de fullerene  $C_{60}$ . Această problemă este una importantă în contextul modelării vibrațiilor moleculare și a spectrelor de oscilație în sisteme simetrice cu multe grade de libertate. Cea de-a doua problemă soluționată vizează modelarea interacțiunii electron-fononice în cristale dopate cu ioni de pământuri rare (PR). Cele mai studiate efecte ale interacțiunii electron-fononice în cazul ionilor de PR în cristale sunt relaxarea multifonică, benzile vibronice, lărgirea benzii în funcție de temperatură sau transferul de energie non-rezonant asistat de fononi. Avându-se în vedere că despicările Stark pentru ionii de PR sunt de ordinul energiei fononilor de rețea, ar putea să apară și alte efecte legate, în special, de procesele în aproximația de cvasirezonanță. Dacă distanța dintre două niveluri Stark este aproape de rezonanță în regiunea spectrului fononic, atunci interacțiunea electron-fononică creează stări vibronice mixte, care determină modificări ale liniilor spectrale optice (lărgirea, asimetria, despicarea sau deplasarea) [6, 7]. În unele cazuri, tranzițiile vibronice și efectele de rezonanță sunt atât de puternice, încât atribuirea nivelurilor electronice este ambiguă. Pentru a avea efecte de rezonanță intense este necesară existența cuplajului electron-fononic destul de puternic și a vârfurilor ascuțite în densitatea fononică din regiunea de rezonanță. Acest lucru explică de ce datele experimentale privind efectele de rezonanță în compuşii ionici se referă, în special, la ionii  $Yb^{3+}$  ( $4f^{13}$ ) [7, 8],  $Tm^{3+}$  ( $4f^{12}$ ) [9],  $Pr^{3+}$  ( $4f^2$ ) [10] sau  $Ce^{3+}$  ( $4f^1$ ) [11], adică la ionii de PR la începutul și la sfârșitul seriei lantanidelor, care posedă o interacțiune electron-fononică destul de puternică [12, 13]. În teză este prezentată analiza spectrelor  $Yb^{3+}$  în  $Y_3Al_5O_{12}$  (YAG). Cristalul YAG este cunoscut ca având vârfuri ascuțite în densitatea fononică [12-14]. Aceste investigații sunt importante atât din punctul de vedere al fizicii teoretice și computaționale, cât și din perspectiva utilizării practice a acestor materiale în calitate de activator laser. Într-adevăr, interacțiunea electron-fononică cvasirezonantă în spectrele optice ale ionilor de PR în compuși anorganici se manifestă prin despicările sau deplasările liniilor electronice, precum și prin efectele termice (deplasări sau lărgiri). Pentru unii ioni, cuplajul electron-fononic determină interferențe destul de mari ale nivelurilor electronice pure cu cele vibronice, astfel încât elucidarea structurii electronice constituie o importantă problemă de soluționat. Aceste efecte depind în mare măsură de rezonanța între nivelurile Stark și energia vârfurilor fononice în apropierea regiunii de rezonanță și

de cuplarea electron-fononică. Această din urmă condiție determină ca efectele să fie mai pronunțate pentru ionii de  $PR^{3+}$  în seria lantanidelor, adică a elementelor chimice din grupa metalelor de tranziție de tip  $f$ . Expresiile analitice obținute pentru despicarea unui nivel electronic în rezonanță cu un nivel vibronic descriu bine datele experimentale pentru  $Yb^{3+}$  în YAG [7]. S-a arătat că aceeași cuplare cvasirezonantă a primelor două niveluri Stark pentru multipletul  ${}^2F_{5/2}$  cu un fonon cu  $\omega \sim 327 \text{ cm}^{-1}$  este responsabilă pentru despicarea celui de-al doilea nivel Stark. Explicarea unor astfel de efecte electron-fononice pronunțate pentru  $Yb^{3+}$  este condiționată de configurația ionilor (deplasări electron-fononice de până la  $35 \text{ cm}^{-1}$  au fost estimate pentru nivelurile electronice  $Tm^{2+}$  ( $4f^{13}$ ) în  $CaF_2$  sau  $SrF_2$ ) și vârfurile de vibrație ascuțite în YAG care ar putea fi asociate cu mișcarea în interiorul sau în exteriorul grupului tetraedric  $AlO_4^{-5}$  [7, 8, 15, 16].

Modelele analitice sunt aplicabile limitat din cauza caracterului complex al sistemelor cercetate, de aceea modelele numerice și simularea pe calculator devin tot mai des utilizate în aceste domenii de cercetare, care astăzi au trăsături interdisciplinare tot mai pronunțate. Vom menționa în acest context că *Wolfram Mathematica* este un program simbolic matematic de calcul folosit în multe domenii științifice și în inginerie. În calitate de mediu de dezvoltare a interfeței web a AAP este utilizat *Oracle Application Express* [17].

Astfel, **scopul principal al tezei** este de a dezvolta modele teoretice și tehnici de creare a aplicației adaptive pentru modelarea pe calculator a vibrațiilor moleculare și a spectrelor de oscilație în sisteme simetrice complexe cu multe grade de libertate. În particular, scopul consistă în determinarea stărilor proprii ale moleculei și ale ionului de fullerene, a interacțiunii electron-fononice în cristale dopate cu ioni de pământuri rare, precum și în compararea rezultatelor teoretice obținute cu datele experimentale, astfel fiind determinat setul de valori corespunzătoare ale parametrilor modelelor fizice folosite. Un alt aspect important al cercetării reprezintă promovarea utilizării succeselor obținute în dezvoltarea aplicațiilor adaptive în procesul de proiectare și realizare a aplicațiilor adaptiv-parametrice în fizica teoretică.

În acest context, **obiectivele majore ale tezei** sunt următoarele:

1. Elaborarea aplicației adaptiv-parametrice pentru modelarea oscilațiilor în sistemele simetrice complexe cu multe particule și compararea cu datele experimentale pentru fullerene.
2. Cercetarea transferului rezonant de energie între patru centre în formalismul hamiltonianului de interacțiune multipolară a ionilor de pământuri rare cu componenta transversală a câmpului electromagnetic.
3. Modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământuri rare în cristale laser și compararea spectrelor de absorbție, pe baza aplicației adaptiv-parametrice elaborate, cu rezultatele numerice obținute pentru forma liniilor de absorbție corespunzătoare.

**Metodologia cercetării științifice** se întemeiază pe teoria grupurilor, teoria rezonanței electron-fononice, teoria aproximației adiabatică în reprezentarea cuantică secundară, modelul

hamiltonianului de interacțiune multipolară a ionilor, precum și pe metode și tehnici de dezvoltare și implementare a aplicațiilor adaptive.

***Noutatea științifică a rezultatelor obținute:***

1. Au fost modelate pe calculator oscilațiile moleculei de fullerene și a fost obținută forma liniei de absorbție pentru ionul  $C_{60}^{-1}$ . Pentru prima dată s-a constatat că lărgimea structurilor obținute depinde de frecvența tranziției radiative spontane.
2. A fost calculat spectrul de oscilații al moleculei de fullerene  $C_{60}$  utilizând reprezentările ireductibile ale teoriei grupurilor.
3. A fost cercetat transferul rezonant de energie între patru centre în formalismul hamiltonianului de interacțiune multipolară a ionilor cu componenta transversală a câmpului electromagnetic local. A fost supusă analizei structura topologică a diagramelor ce descriu fenomenul fizic respectiv, fiind identificate mecanisme distincte de transfer în conformitate cu cuplajul acceptorului la donori și după reductibilitatea diagramelor.
4. A fost modelată interacțiunea electron-fononică de rezonanță pentru ionul  $Yb^{3+}$  în trei cristale laser diferite:  $Yb^{3+}$ (5at.%) în YAG,  $Yb^{3+}$ (0.2at.%) în  $LiNbO_3$  și  $Yb^{3+}$ (20at.%) în itrium-litium-fluorid (YLF), rezultatele numerice obținute pentru forma liniilor de absorbție fiind comparate cu spectrele experimentale.

***Problema științifică soluționată*** constă în elaborarea aplicației adaptiv-parametrice pentru analiza, procesarea și generarea datelor la cercetarea sistemelor fizice complexe, ceea ce a rezultat cu modelarea fullerenelor și a cristalelor laser dopate cu ioni de pământuri rare pentru utilizarea în asistența cercetătorilor la soluționarea acestor familii de probleme.

***Semnificația teoretică*** a tezei își găsește exprimare în elaborarea algoritmului de descompunere a reprezentării mecanice a sistemului în reprezentări ireductibile și în modelarea oscilațiilor moleculei de fullerene. A fost cercetat transferul rezonant de energie între patru centre în formalismul hamiltonianului de interacțiune multipolară a ionilor. De asemenea, a fost propusă și implementată o tehnică proprie de elaborare a aplicațiilor adaptive pentru asistența modelării pe calculator a problemelor fizice.

***Valoarea aplicativă*** a lucrării este determinată, în primul rând, de faptul că a fost realizată aplicația adaptivă pentru determinarea stărilor vibraționale ale moleculelor de fullerene și pentru modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământuri rare în diferite cristale laser. De asemenea, rezultatele obținute în domeniul modelării sistemelor complexe sunt utilizate în cadrul Proiectului instituțional de cercetări științifice fundamentale 15.817.02.29F, direcția strategică „Materiale, tehnologii și produse inovative”. Bineînțeles, cercetările respective sunt reflectate și în curriculele cursurilor universitare „Fizica clusterilor” și „Modelarea sistemelor complexe” pentru studii la masterat, precum și „Metodologia cercetării” și „Procesarea datelor și data mining” incluse în programul de studii avansate de doctorat, ținute la

Universitatea de Stat din Moldova (USM), precum și la proiectarea și crearea aplicațiilor pe calculator.

***Rezultatele științifice principale înaintate spre susținere:***

1. A fost propus algoritmul de obținere a deplasărilor simetrizate în sisteme simetrice complexe cu multe grade de libertate și pe baza algoritmului dat sunt determinate stările vibraționale ale moleculelor de fullerene.
2. Forma liniei de absorbție pentru ionul  $C_{60}^{-1}$  este determinată de rezonanța electron-vibrațională și lărgimea ei depinde de frecvența tranziției radiative spontane.
3. Hamiltonianul de interacțiune multipolară a ionilor de pământuri rare a fost generalizat pentru cazul a patru centre și a fost cercetat transferul rezonant de energie.
4. Pe baza aplicației adaptiv-parametrice elaborate a fost simulată forma liniilor de absorbție în cristale laser dopate cu ioni de  $Yb^{3+}$ , fiind în concordanță cu rezultatele experimentale.

***Aprobarea și implementarea rezultatelor științifice:*** Materialele tezei au fost prezentate la conferințe științifice naționale și internaționale: 8<sup>th</sup> International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics (MSCMP-2016), „Mathematics&IT: Research and Education” (MITRE-2015), 7th International Conference on Physics of Advanced Materials (Iași, UAIC), conferințele științifice naționale anuale cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare. Atelierul „Fizică și Inginerie”, organizate de Universitatea de Stat din Moldova, Conferința Națională de Fizică etc. Rezultatele obținute sunt utilizate în cadrul Proiectului instituțional de cercetări științifice fundamentale 15.817.02.29F, direcția strategică „Materiale, tehnologii și produse inovative”. Cercetările respective sunt reflectate și în curriculele cursurilor universitare „Fizica clusterilor”, „Modelarea sistemelor complexe”, „Metodologia cercetării” și „Procesarea datelor și data mining” ținute la Universitatea de Stat din Moldova.

**Publicații la tema tezei.** Conținutul de bază al tezei este reflectat în 20 de lucrări științifice la tema tezei, inclusiv 2 articole cotate ISI, 4 articole în reviste științifice cu recenzii din Registrul național al revistelor științifice (categoria B) și 11 teze la conferințe internaționale și naționale de specialitate, inclusiv 5 publicații fără coautori și 5 comunicări la foruri științifice naționale și internaționale de specialitate.

**Volumul și structura tezei.** Teza constă din introducere, trei capitole, concluzii generale și recomandări, bibliografia ce cuprinde 173 titluri. Lucrarea conține 25 figuri, 7 tabele, 5 anexe și este expusă pe 172 pagini.

**Cuvinte-cheie:** fullerene, ioni de pământuri rare, interacțiune electron-vibrațională, interacțiune electron-fononică, modelare, aplicație adaptivă, sistem complex.

## CONȚINUTUL TEZEI

În **Introducere** sunt argumentate actualitatea și importanța problemei abordate, fiind punctate scopul și obiectivele tezei, specificate noutatea științifică a rezultatelor obținute, metodologia cercetării și problema științifică soluționată, semnificația teoretică și valoarea aplicativă a lucrării, precum și aprobarea rezultatelor.

Materia cuprinsă în **Capitolul 1**, intitulat „*Concepte evaluate ale modelării proceselor fizice prin utilizarea aplicațiilor adaptive*”, reprezintă o trecere în revistă a literaturii în domeniul de cercetare pe care este axată teza, fiind astfel la final formulate scopul și obiectivele tezei, precum și problemele de cercetare și direcțiile de soluționare a lor în teză.

În **Capitolul 2**, având titlatura „*Modelarea vibrațiilor moleculare și spectrelor de oscilație în sisteme simetrice cu multe grade de libertate și determinarea stărilor proprii ale moleculei și ionului de fullerene*”, este rezolvată problema inversă pentru dinamica fullerenului  $C_{60}$ , sunt formulate modelul semiclassical și metoda numerică de evaluare a spectrului energetic, fiind prezentat operatorul de interacțiune electron-vibrațională pentru fullerenul  $C_{60}$  și cercetată influența rezonanței electron-vibraționale asupra liniei de absorbție în ionul  $C_{60}^{-1}$ . În acest context, este dezvoltat modelul teoretic și formulat algoritmul de calcul pentru obținerea deplasărilor simetrizate în sistemele simetrice complexe utilizând reprezentările ireductibile ale teoriei grupurilor. Rezultatele calculului pentru molecula de fullerene sunt comparate cu datele experimentale, fiind prezentată și structura sistemului informatic adaptiv pentru determinarea stărilor vibraționale ale moleculei de fullerene, precum și implementarea practică a aplicației. Importanța practică a algoritmului respectiv se bazează pe posibilitatea automatizării procesului de descompunere a reprezentării mecanice a sistemului în reprezentări ireductibile, care este foarte importantă la cercetarea sistemului simetric complex prin utilizarea teoriei grupurilor. Metoda propusă utilizează concepte informatice ca: problemă, problemă bine-structurată, problemă slab-structurată, sistem suport pentru decizii, familie de fullerene, familia problemelor de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene, teorie formală (axiomatizată) a domeniului de cercetare. Familia problemelor de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene este o familie numărabilă de probleme, iar elementele acestei familii sunt probleme slab-structurate.

În modelul utilizat în [18] și prezentat în Figura 1 forțele de interacțiune între atomi sunt de tip Hooke: fiecărei legături chimice (monovalente pe pentagoane și bivalente pe hexagoane) i se pun în evidență constante de elasticitate Hooke:  $p$  pentru pentagoane și  $h$  pentru hexagoane. Se introduc și constantele elastice  $\pi$  pentru interacțiunea între două legături monovalente și  $\eta$  pentru interacțiunea între legăturile de diferite tipuri. Astfel, potențialul de interacțiune are forma:

$$\begin{aligned} U(r_i^{(p)}, r_i^{(h)}, \theta_i^{(\pi)}, \theta_i^{(\eta)}; p, h, \pi, \eta) = \\ = \sum_{i=1}^{60} \frac{p(r_i^{(p)} - r_0^{(p)})^2}{2} + \sum_{i=1}^{30} \frac{h(r_i^{(h)} - r_0^{(h)})^2}{2} + \sum_{i=1}^{60} \frac{\pi(\theta_i^{(\pi)} - \theta_0^{(\pi)})^2}{2} + \sum_{i=1}^{120} \frac{\eta(\theta_i^{(\eta)} - \theta_0^{(\eta)})^2}{2}, \end{aligned} \quad (1)$$

unde  $r_i^{(p)}$ ,  $r_i^{(h)}$  reprezintă distanța dintre atomi în legatura  $i$  monovalentă sau bivalentă, corespunzător;  $r_0^{(p)}$ ,  $r_0^{(h)}$  – distanța dintre atomi în legatura neperturbată monovalentă sau bivalentă, corespunzător;  $\theta_i^{(\pi)}$ ,  $\theta_i^{(\eta)}$  – unghiul  $i$  dintre legaturi echivalente sau diferite, corespunzător;  $\theta_0^{(\pi)}$ ,  $\theta_0^{(\eta)}$  – unghiul neperturbat dintre legaturi echivalente sau diferite, corespunzător.

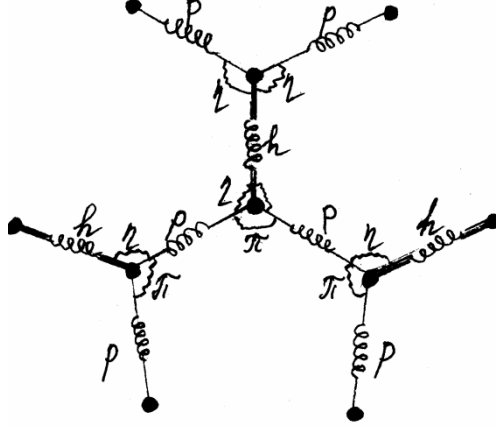


Fig. 1. Modelul interacțiunii elastice pentru un fragment de  $C_{60}$ .

Simetria tipurilor de oscilații se determină din dezvoltarea reprezentării reducibile mecanice după reprezentările ireductibile ale grupului  $I_h$  [19, pp. 38-40]:

$$\Gamma_{mec} = 2A_g + 3T_{1g} + 4T_{3g} + 6G_g + 8H_g + A_u + 4T_{1u} + 5T_{3u} + 6G_u + 7H_u . \quad (2)$$

Indicii  $g$  și  $u$  din (2) denotă reprezentarea ireductibilă pară și, respectiv, impară. Deoarece operatorul  $K$  comută cu toate operațiile  $g$  ale grupului  $I_h$  ( $g^{-1}Kg = K$ ), acesta poate fi adus la forma cvasidiagonală utilizând proiectorul simetric [19]:

$$P_{ij}^\gamma = \frac{l^\gamma}{G} \sum_{g \in G} D_{ij}^{\gamma*}(g) g , \quad (3)$$

unde  $G$  este ordinul grupeii, iar  $l^\gamma$  este dimensiunea reprezentării  $\gamma$ . Utilizând operatorul de proiecție (3), pot fi construite deplasările simetrice:

$$|O_{ij}^\gamma\rangle = \left( \frac{l^\gamma}{G} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{g \in G} D_{ij}^{\gamma*}(g) |gO\rangle . \quad (4)$$

În baza deplasărilor simetrice (4), operatorul  $K$  are formă cvasidiagonală [20], care reiese din (2):

$$K = K^{(2)}(A_g) + 3K^{(4)}(T_{1g}) + 3K^{(4)}(T_{3g}) + 4K^{(6)}(G_g) + 5K^{(8)}(H_g) + \\ + K^{(1)}(A_u) + 3K^{(5)}(T_{1u}) + 3K^{(5)}(T_{3u}) + 4K^{(6)}(G_u) + 5K^{(7)}(H_u) , \quad (5)$$

unde  $NK^{(n)}(\gamma)$  denotă blocul matriceal de dimensiunea  $(n \times n)$  și care posedă  $n$  valori proprii de tip  $\gamma$ , iar  $N$  denotă degenerarea oricărei valori proprii. Elementele de matrice din (5) se calculează după formula:



$$\langle X_{ij}^\gamma | K | Y_{kl}^\beta \rangle = \sum_{g \in G} D_{jl}^{\gamma^*}(g) \langle X | K | gY \rangle \delta^{\gamma\beta} \delta_{ik},$$

unde  $X, Y$  denotă orice orbită  $A, B$ ,  $\langle X | K | gY \rangle$  fiind tabulate în [21], iar  $D_{jl}^\gamma$  este matricea reprezentării ireductibile  $\gamma$  a grupului  $I_h$ . Algoritmul de calcul este prezentat în tabelul de mai jos.

Tabelul 1. Algoritmul de calcul pentru molecula de fullerene

1. Se construiește câte un proiector pentru fiecare tip al reprezentării ireductibile, după formula:
$\hat{P}^{(i)} = \sqrt{\frac{l_i}{m}} \sum_{g \in G} \bar{\chi}_i(g) \hat{T}(g).$
2. Se găsesc vectorii proprii cu valori proprii egale cu 1, care vor servi bază a subspațiului invariant al proiectorului.
3. Se obține combinația liniară a vectorilor de bază obținuți pentru proiectorul unei reprezentări ireductibile concrete, care va fi vectorul oscilației normale.

Un rezultat marcat de către doctorand este realizarea vizualizării rezultatelor. Fiecare frecvență este însoțită de reprezentările grafice ale stărilor vibraționale respective. De menționat că prin metoda infografică este astfel arătată degenerarea fiecărei frecvențe. Aceasta se realizează prin afișarea alături de frecvențe a reprezentărilor grafice ale stărilor proprii corespunzătoare.

Molecula de fullerene  $C_{60}$  posedă simetria icosaedruului (Fig. 2 (a)), iar însuși fullerenul reprezintă un icosaedru cu vârfurile teșite (Fig. 2 (b)). Există 60 de operatori diferiți de rotație, a căror acțiune transformă icosaedrul în sine. Fiecărui operator de rotație  $i$  se poate pune în corespondență operatorul de reflexie care păstrează simetria icosaedruului.

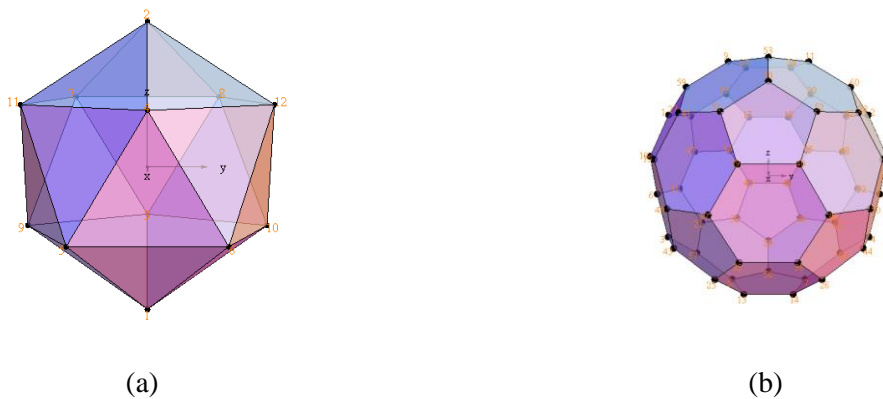


Fig. 2. Icosaedru (a) și icosaedru trunciat (b).

Cu ajutorul coordonatelor vârfurilor poate fi construită reprezentarea tridimensională a grupului de rotație, a cărui bază coincide cu baza sistemului cartezian de coordonate  $(x, y, z)$ . Acest proces constă din două etape. Prima etapă reprezintă stabilirea a 12 rotații ale icosaedruului, care translează unul dintre cele 12 vârfuri ale icosaedruului într-un vârf prestabilit (de exemplu, în punctul 2 din Fig. 2 (a)), pentru care însuși icosaedrul se transformă singur în sine fără modificarea orientării în

sistemul de coordonate. Aceste rotații se găsesc într-un mod simplu din considerente geometrice. A doua etapă reprezintă aplicarea operatorului de rotație în jurul unei axe care trece prin vârful selectat la prima etapă (în exemplul nostru, axa trece prin nodurile 1, 2 din Fig. 2 (a)), pentru fiecare operator utilizat la etapa dată. Astfel, aplicând fiecărui dintre primele 12 vârfuri 5 operatori de rotație în jurul axei cu  $\frac{2\pi}{5}i$ , unde  $i = 0, 1, 2, 3, 4$ , vom obține toți cei 60 de operatori de rotație. Pentru a obține grupul complet, care ar conține și reflexia, fiecare din cei 60 de operatori de rotație se multiplică cu operatorul de reflexie (inversie) față de unul dintre planurile de reflexie (de exemplu, în Figura 2 (a) se poate alege planul  $(x,z)$ , ceea ce este echivalent operatorului  $y \rightarrow -y$ ). Pentru stabilirea reprezentării mecanice a grupului, fiecare atom de fullerene (adică, vârful icosaedrului teșit) trebuie asociat cu o bază locală, pe vectorii căreia va fi descompus vectorul de deplasare, așa cum este prezentat în Figura 3. Se poate alege orice bază ortonormată, de exemplu, care ar coincide cu axele  $x,y,z$ . Pentru comoditate, unuia dintre atomi i s-a atribuit următoarea bază: primul vector coincide cu raza vectorială a atomului; al doilea vector se alege perpendicular primului, astfel încât să fie coplanar cu muchia formată de două fețe hexagonale; al treilea vector se determină ca produs vectorial al primilor doi vectori, ceea ce automat îi asigură ortogonalitatea în raport cu primii doi vectori. Un astfel de triplet ordonat de vectori formează o bază de dreapta, adică produsul mixt al acestor vectori este mai mare decât zero. Prin rotirea acestui atom cu operatorii de rotație putem obține baza locală pentru orice alt atom.

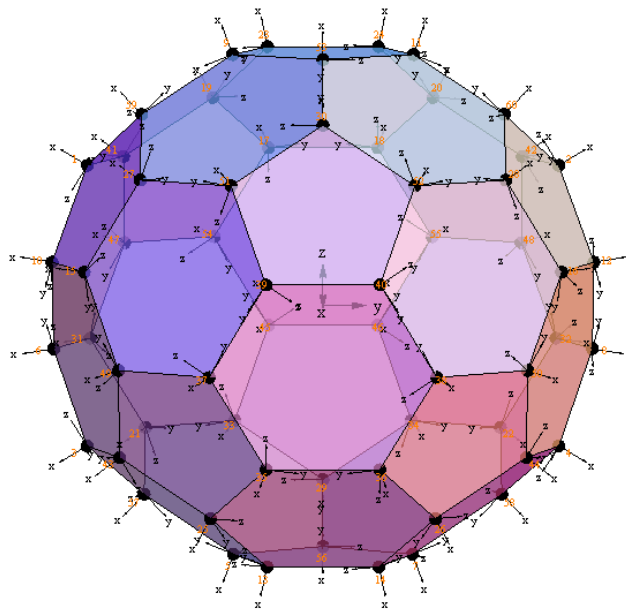


Fig. 3. Formarea bazelor locale ale deplasărilor atomilor moleculei de fullerene.

Pentru a obține reprezentarea mecanică a operatorilor, operatorul elementului  $g_i$  se prezintă ca o matrice  $A^{(i)}$  din  $60 \times 60 = 3600$  blocuri  $B_{lm}^{(i)}$ , unde fiecare bloc este o matrice  $3 \times 3$ . Adică, dimensiunea matricei operatorului elementului  $g_i$  coincide cu numărul de grade de libertate ale fullerenuului și conține 32400 de elemente. Dacă operatorul  $i$  transferă atomul  $m$  în  $l$ , atunci

matricea  $B_{lm}^{(i)}$  este o matrice unitară care transformă baza atomului  $m$  în baza atomului  $l$ . Dacă operatorul nu transformă atomul  $m$  în atomul  $l$ , atunci matricea  $B_{lm}^{(i)}$  este nulă. Evident că doar un singur bloc este nenul în fiecare coloană și în fiecare rând al matricei  $A^{(i)}$ , deoarece fiecare atom se transformă doar într-un alt atom. Reprezentarea mecanică a moleculei de fullerene poate fi descompusă în reprezentări ireductibile (2), precum în lucrarea [19]. Reprezentarea oscilatorului conține toate reprezentările ireductibile, cu excepția reprezentărilor tridimensionale care corespund translării ( $T_{1u}$ ) și rotației ( $T_{1g}$ ). Cunoscând reprezentarea mecanică, nu este complicat a crea proiectorii după formula  $\hat{P}^{(i)}\bar{x} = \lambda\bar{x} = \sum_k y'_k \bar{e}_k^{(y)}$  și a găsi vectorii lor proprii, care reprezintă o bază a subspațiului său invariant, unde indicele  $k$  parcurge toate proiecțiile în subspațiul invariant. Formând funcția energiei potențiale de la coordonate în această bază a subspațiului, nu este greu a stabili asemenea combinații liniare ale acestor vectori care ar fi coordonate normale. Descompunem energia potențială în seria Taylor până la derivata doi în jurul punctului cu starea neperturbată. Putem alege energia potențială astfel ca termenul zero să fie nul, iar suma termenelor cu derivata întâi să fie egală cu zero, deoarece energia potențială este minimală în starea neperturbată. Atunci energia potențială va avea forma  $U = \sum_{i,j} a_{ij} x_i x_j$ . Diagonalizând matricea  $|a_{ij}|$ , vom obține vectorii proprii care coincid cu vectorii oscilațiilor normale, ceea ce reiese din sensul procedurii de diagonalizare a matricei, deoarece matricea obținută va avea valori nenule doar pe diagonală, care corespund termenului  $a'_{ii} x_i'^2$ . Substituind vectorii obținuți ai oscilațiilor normale în funcția energiei potențiale, din ecuația Lagrange vom avea  $m\ddot{x}'_i + a'_{ii}x'_i = 0$ ,  $\frac{a'_{ii}}{m} = \omega_i^2$ , unde  $\omega_i^2$  este pătratul frecvenței unghiulare a oscilațiilor normale. Valorile  $\omega_{\text{theor}}$  sunt obținute pentru fullerene în modelul interacțiunilor elastice (a se vedea ecuația (1)) și sunt prezentate în Tabelul 2. Parametrii au fost calculați minimizând funcționala  $F(p, h, \pi, \eta) = \sum_{i=1}^{10} \|\omega_{\text{exp}}^{(i)} - \omega_{\text{teor}}^{(i)}\|^2$  prin metoda gradientului [22]. După minimizarea funcționalei, abaterea standard relativă s-a micșorat până la valoarea de 14.7% pentru constante de elasticitate:  $p = 384.0 \text{ N/m}$ ,  $h = 443.8 \text{ N/m}$ ,  $\pi/a^2 = 67.4 \frac{\text{N}}{\text{m}\cdot\text{rad}^2}$ ,  $\eta/a^2 = 54.3 \frac{\text{N}}{\text{m}\cdot\text{rad}^2}$ , unde  $a = 0.14 \text{ nm}$  este distanța dintre atomii vecini. Rezultatul obținut diferă de acel prezentat în [20] din cauza că am folosit date experimentale precizate [23, 24] și am utilizat o precizie mai mare datorită numărului de iterații mai mare.

În lucrările [25–29] frecvențele teoretice au fost obținute cu ajutorul teoriei funcționalei de densitate (DFT) în aproximația densității locale (LDA). În dependență de setul ales de funcții ale bazei, de exemplu în descompunerea a 24000 de unde plane [27], care necesită resurse computaționale substanțiale, au fost obținute următoarele abateri standard relative de la valorile experimentale: 0.039 [25], 0.1 [26], 0.019 [27], 0.019 [28], 0.022 [29].

Tabelul 2. Comparația dintre frecvențele teoretice și experimentale ale oscilațiilor normale pentru molecula de fullerene

	Gradul degenerării	$\omega_{\text{theor, cm}^{-1}}$	$\omega_{\text{theor, cm}^{-1}}$ [30]	$\omega_{\text{theor, cm}^{-1}}$ [24]	$\omega_{\text{exp, cm}^{-1}}$ [23, 24]	$\omega_{\text{exp, cm}^{-1}}$ [31]
$A_g$	1	374 1369	510 1830	494 1607	496 1470	497 1469
$T_{1g}$	3	450 885 1327	513 1045 1662	565 813 1309	568 831 1289	567 875 1282
$T_{3g}$	3	542 638 874 1491	615 724 951 1900	547 717 757 1385	553 756 796 1345	536 - 800 1333
$G_g$	4	369 513 599 1012 1443 1600	433 593 657 1327 1813 2006	484 554 745 1123 1332 1578	485 567 736 1079 1310 1482	487 569 756 - 1307 1501
$H_g$	5	229 357 485 627 999 1187 1479 1675	274 413 526 828 1292 1575 1910 2068	259 427 694 760 1103 1328 1535 1628	272 433 709 772 1099 1252 1425 1575	271 434 711 774 1101 1248 1422 1573
$A_u$	1	1101	1243	929	984	946
$T_{1u}$	3	419 457 1098 1416	478 618 1462 1868	522 570 1227 1560	526 575 1182 1429	- 574 1182 1427
$T_{3u}$	3	307 483 851 1123 1574	358 526 1122 1543 1954	330 696 954 1239 1598	343 753 973 1205 1525	- - 1044 1200 1536
$G_u$	4	300 604 769 849 1440 1571	360 663 876 1086 1845 2004	353 708 753 970 1369 1525	353 764 776 961 1309 1422	- - - 960 1313 -
$H_u$	5	339 414 514 731 1167 1426 1676	405 470 569 849 1464 1797 2086	399 533 654 727 1243 1387 1622	403 534 668 743 1223 1344 1567	- - 667 682 1219 1375 -

În lucrarea [30] este folosit, ca și în studiul nostru, modelul interacțiunii elastice pentru patru parametri. S-a obținut abaterea standard relativă de 0.228, care este cu 8.1% mai mare decât în calculele noastre. Această diferență poate fi explicată prin faptul că în studiul nostru am optimizat parametrii de interacțiune între atomi, ținându-se cont de legăturile cu valențe diferite din molecula de fullerene, pe când în [30] parametrii  $p$ ,  $h$ , pe de o parte, și  $\pi$ ,  $\eta$ , pe de altă parte, sunt egali. Astfel, din comparația frecvențelor teoretice obținute cu cele prezentate în [25–30] putem conchide că rezultatele noastre au îmbunătățit cu 8.1% rezultatele modelului elastic, însă DFT poate conduce la rezultate mai exacte în cadrul unor calcule cu un consum ridicat de resurse computaționale.

În Figura 4 sunt prezentate, în aspect comparat, datele teoretice calculate în baza algoritmului dezvoltat cu valorile experimentale [23, 24]. Mai multe rezultate experimentale sunt raportate în

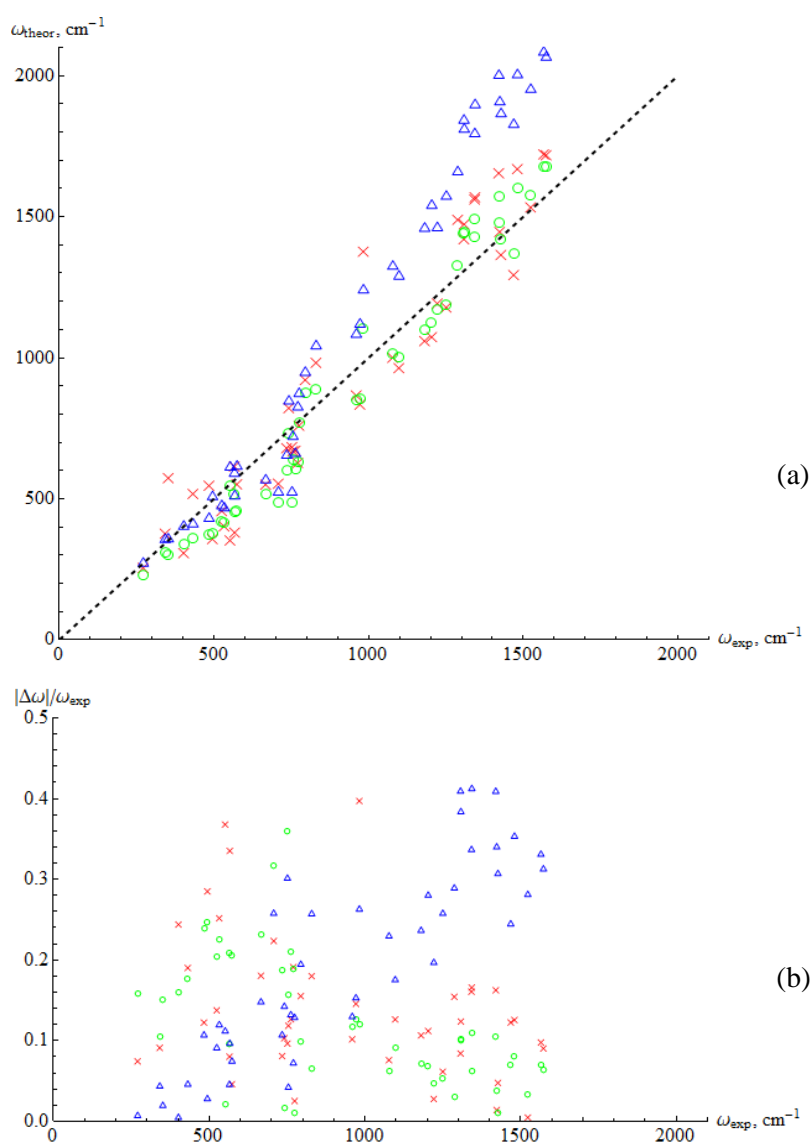


Fig. 4. Compararea rezultatelor teoretice cu datele experimentale: deviația frecvențelor teoretice de cele experimentale (a), dependența erorii relative de frecvența experimentală (b): „ $\circ$ ” – rezultatele teoretice obținute în aplicația adaptiv-parametrică dezvoltată, „ $\times$ ” – rezultatele teoretice obținute în [20], iar „ $\Delta$ ” corespund rezultatelor teoretice din [30].

[32–39]. Dreapta punctată din Figura 4 (a) reprezintă bisectoarea cadranelui întâi. Din figurile 4 (a) și 4 (b) se observă că oscilațiile cu frecvențe mai mici aduc un aport mai mare în abaterea de la valorile experimentale. Totodată, putem observa că modelul teoretic reduce frecvențele mici și mărește frecvențele mai mari. Pentru a descrie mai exact oscilațiile fullerenui pot fi utilizate funcțiile potențiale optimizate Tersoff sau Brenner [40], teoria DFT sau teoria de perturbație a funcționalei de densitate (DFPT) [31, 38, 41]. De menționat că spectrul de vibrație al structurii cristaline (grupul de simetrie  $T_h$ ) formate din molecule de fullerene  $C_{60}$  hidratate în soluții apoase a fost calculat folosind și abordarea dinamicii moleculare (MD) [42], fiind propusă și ecuația de stare pentru soluții apoase de fullerene  $C_{60}$  [43].

În **Capitolul 3**, intitulat „*Modelarea interacțiunii electron-fononice în cristale dopate cu ioni de pământuri rare*”, sunt prezentate, mai întâi, fundamentele teoretice ale modelării proceselor fizice în cristalele dopate cu ioni de pământuri rare, care includ modelul de acoperire al câmpului cristalin, definirea stărilor electronice, a elementelor de matrice ale operatorului evoluției și a interacțiunii electron-fononice (IEF) în cristale ce conțin impurități de ioni de pământuri rare; sunt elucidate și tehnicile de calcul pentru secțiunea medie de împrăștiere și corelator. În continuare este aplicat transferul rezonant de energie între patru centre în modelul hamiltonianului de interacțiune multipolară a ionilor. A fost obținută formula pentru probabilitatea de transfer al energiei în cristale dopate cu ioni de pământuri rare utilizând metoda dată a hamiltonianului de interacțiune multipolară. Au fost analizate tranzițiile fononice și rezonante, care pot fi utilizate în selectarea cristalelor dopate cu ioni de pământuri rare pentru obținerea elementelor logice pentru calculatoarele cuantice. Modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru  $Yb^{3+}$  în trei cristale laser este realizată pe baza aplicației adaptiv-parametrice elaborate, fiind efectuată și comparația spectrelor de absorbție experimentale cu rezultatele numerice obținute pentru forma liniilor de absorbție, care demonstrează o bună concordanță cu datele experimentale la tranziția  ${}^2F_{7/2}(1) \rightarrow {}^2F_{5/2}$  pentru  $Yb^{3+}(5at.%)$  în YAG, a unei părți a spectrului de absorbție al  $Yb^{3+}(0.2at.%)$  în  $LiNbO_3$  la 10 K și a spectrului de absorbție polarizat pentru  $Yb^{3+}(20at.%)$  în YLF la 10 K.

Cercetarea dată reprezintă o abordare teoretică [44] a problemei IEF în aproximația de cvasirezonanță pentru ionii de PR în cristale laser, în acest context fiind dezvoltat aspectul de modelare a IEF, care a fost propusă în [45]. Sunt prezentate expresiile pentru forma liniei spectrale, de absorbție sau de emisie, iar modelul teoretic este aplicat pentru a explica unele caracteristici spectrale ale tranzițiilor observate experimental [44–46]. Problema teoretică este de a obține funcția pentru forma liniei de absorbție sau emisie a luminii de frecvență  $\Omega$  între cele două stări ale sistemului electron-fononic în condiții apropiate de rezonanță (cvasirezonanță). Hamiltonianul total  $H = H_L + H_e + V$ , conține hamiltonianul electronic  $H_e$ , hamiltonianul de vibrație  $H_L$  și hamiltonianul de interacțiune electron-fononică  $V$ . Hamiltonianul de interacțiune poate fi scris, în primul rând, ca

$$V = \sum_k (v_k a_k + v_k^* a_k^\dagger).$$

Aici  $k=(\vec{k}, \mu)$  caracterizează fononii,  $\vec{k}$  fiind impulsul fononic și  $\mu$  ramura vibrației, iar  $a_k, a_k^\dagger$  denotă operatorii de anihilare și de creare,  $v_k$  – operatorii electronici. În cazul în care  $|s\rangle$  și  $|p\rangle$  sunt funcțiile proprii ale Hamiltonianului total  $H = H_L + H_e + V$  și  $|s\rangle$  este starea inițială, atunci funcția formei liniei de absorbție a luminii de frecvență  $\Omega$  poate fi scrisă în modul următor:

$$F(\Omega) = \sum_p |\langle p|d|s\rangle|^2 \delta(\Omega - \Omega_{ps}),$$

unde  $\Omega_{ps} = E_p - E_s$  și  $d$  este operator electronic de tranziție. Folosind formula

$$\delta(\Omega - \Omega_{ps}) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{+\infty} \exp[i(\Omega_{ps} - \Omega)t - \gamma t] dt,$$

unde  $\gamma$  este lărgimea intrinsecă a liniei, funcția poate fi scrisă în forma:

$$F(\Omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{+\infty} I(t) \exp[-i\Omega t - \gamma t] dt$$

cu

$$I(t) = \sum_p \langle s|d^+|p\rangle e^{i(E_p - E_s)t} \langle p|d|s\rangle, \quad (6)$$

scrisă cu  $I(t) = \sum_p \langle s|d^+|p\rangle \langle p|e^{iHt} d e^{-iHt}|s\rangle$ . În notația  $(t) = e^{iHt} d e^{-iHt}$ , formula (6) devine [15]:

$$I(t) = \langle s|d^+d(t)|s\rangle.$$

Operatorul unitate poate fi scris ca o sumă după funcțiile proprii ale hamiltonianului neperturbat  $H_0 = H_L + H_e$ :

$$I = \sum_{r, n_k} |r; \dots n'_k \dots\rangle \langle r; \dots n'_k \dots|,$$

unde  $r$  reprezintă stările electronice și  $n'_k$  este numărul de ocupare a stării fononice cu vectorul de undă  $k$ . Dacă presupunem că nivelul inițial este neperturbat de interacțiunea electron-fononică, atunci starea inițială  $|s\rangle$  este funcția proprie pentru  $H_0 = H_L + H_e$  și poate fi scrisă ca  $|i; \dots n_k \dots\rangle$ , unde  $i$  este starea electronică inițială și  $n_k$  este numărul de ocupare a stării fononice cu vectorul  $k$ . Expresia finală pentru funcția formei liniei este

$$F(\Omega) = \frac{1}{\pi} \sum_f |\langle i|d|f\rangle|^2 \frac{\gamma + \Gamma_f(\Omega)}{[\Omega - \Omega_{fi} - \Sigma_f(\Omega)]^2 + [\gamma + \Gamma_f(\Omega)]^2}.$$

unde, neglijând lărgimea intrinsecă  $\gamma$ , putem scrie pentru starea  $f$ :

$$\Gamma_f(\Omega) = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_{r, k} |\langle f|v_k|r\rangle|^2 [(n_k + 1)\delta(\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} - \omega) + n_k \delta(\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} + \omega)], \quad (7)$$

$$\Sigma_f(\Omega) = \frac{1}{\hbar^2} P \sum_{r, k} |\langle f|v_k|r\rangle|^2 \left[ \frac{n_k + 1}{\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} - \omega_k} + \frac{n_k}{\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} + \omega_k} \right]. \quad (8)$$

Dacă vom trece în (7) și (8) de la sume la integrale și vom utiliza densitatea stărilor fononice, obținem:

$$\Gamma(\Omega) = \frac{\pi}{\hbar^2} \sum_r \int_0^\infty A_r(\omega) \rho(\omega) \{ [n(\omega) + 1] \delta(\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} - \omega) + n(\omega) \delta(\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} + \omega) \} d\omega, \quad (9)$$

$$\Sigma(\Omega) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_r P \int_0^\infty A_r(\omega) \rho(\omega) \left[ \frac{n(\omega) + 1}{\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} - \omega} + \frac{n(\omega)}{\Omega - \Omega_{fi} + \Delta_{fr} + \omega} \right] d\omega, \quad (10)$$

unde  $\rho(\omega)$  indică în (9) și (10) densitatea stărilor fononice,  $A_r(\omega)$  reprezintă elementul de matrice al interacțiunii electron-fononice mediate după fononii cu frecvența  $\omega$ , iar  $\Delta_{fr}$  determină poziția nivelului electronic nedespicat.  $\Gamma(\Omega)$  reprezintă lărgirea formei liniei, iar  $\Sigma(\Omega)$  este deplasarea ei. Despicarea este data de ecuația prezentată în lucrarea [47],  $\Omega - \Omega_{fi} - \Sigma_f(\Omega) = 0$ .

Acest model teoretic este folosit în continuare pentru obținerea nivelurilor energetice pentru  $\text{Yb}^{3+}$  în YAG. Spectrele de absorbție pentru  $\text{Yb}^{3+}$  în YAG la diferite temperaturi au fost măsurate cu un sistem de rezoluție înaltă. Deoarece  $\text{Yb}^{3+}$  ( $4f^{13}$ ) înlocuiește în YAG  $\text{Y}^{3+}$  pozițiile dodecahedrale de simetrie locală  $D_2$ , atunci 2 multiplete  ${}^2F_{7/2}$  (fundamental) și  ${}^2F_{5/2}$  (excitat) se despică în 4 și 3 dublete Stark, respectiv. Parametrii sunt utilizați pentru modelarea formei liniei de absorbție pentru  $\text{Yb}^{3+}$  în cvasirezonanță [45], iar rezultatele calculelor numerice sunt prezentate în figurile 5–7 pentru  $\text{Yb}^{3+}$ (5at.%) în YAG,  $\text{Yb}^{3+}$ (0.2at.%) în  $\text{LiNbO}_3$  și  $\text{Yb}^{3+}$ (20at.%) în YLF la 10 K, respectiv. Astfel, în Figura 5 (a) este prezentat spectrul de absorbție la 10 K, care corespunde tranzițiilor  ${}^2F_{7/2} \rightarrow {}^2F_{5/2}$  pentru  $\text{Yb}^{3+}$ (5at.%) în YAG. Spectrul ar trebui să conțină doar trei linii zero-fononice pentru  $\text{Yb}^{3+}$  corespunzătoare tranzițiilor permise  ${}^2F_{7/2}(1) \rightarrow {}^2F_{5/2}$  în  $D_2$  din componenta Stark fundamentală [44]. Prin urmare, pentru a explica spectrele a fost propus următorul model: liniile B și C sunt componentele rezonante despicate pentru al doilea nivel Stark  $E_2$  pentru multipletul excitat  ${}^2F_{5/2}$  al  $\text{Yb}^{3+}$ , în timp ce liniile C' și C'' corespund despicării pentru al treilea nivel Stark  $E_3$ . Dacă B și C sunt componente rezonante despicate, potrivit relației pentru raportul dintre intensitățile celor 2 vârfuri  $\frac{I_1}{I_2} = \frac{\Omega_2 - \Delta_{fr}}{\Delta_{fr} - \Omega_1}$ , se obține poziția nivelului electronic nedespicat, adică  $\Delta_{fr} \sim 323 \text{ cm}^{-1}$  ( $E_2 \sim 10650 \text{ cm}^{-1}$ ), energia fononilor cvasirezonanță  $\omega_1 \sim 327 \text{ cm}^{-1}$  și parametrul de interacțiune  $B^{1/2} \sim 26 \text{ cm}^{-1}$ . De menționat că densitatea fononilor în YAG are un vârf ascuțit și intens la  $\omega_1 \sim 327 \text{ cm}^{-1}$ , așa cum s-a observat și la alți ioni [14]. Celelalte vârfuri din jurul lui B sau C sunt vibronice, care indică o creștere în intensitate, deși poziția lor în raport cu A (în limita erorilor experimentale ale acestor date publicate) este nedeplasată. Dacă liniile C' și C'' sunt considerate despicate rezonant, atunci la fel se obține  $\Delta_{fr} \sim 596 \text{ cm}^{-1}$  ( $E_3 \sim 10921 \text{ cm}^{-1}$ ),  $\omega_2 \sim 603 \text{ cm}^{-1}$ , fiind într-o concordanță bună cu vârful fononic ascuțit din YAG [12, 13] și  $B^{1/2} \sim 13 \text{ cm}^{-1}$ . Acest model oferă o schemă nouă pentru nivelul energetic electronic pentru multipletul  ${}^2F_{5/2}$  al  $\text{Yb}^{3+}$  în YAG: 10327, 10650 și  $10921 \text{ cm}^{-1}$  [44].



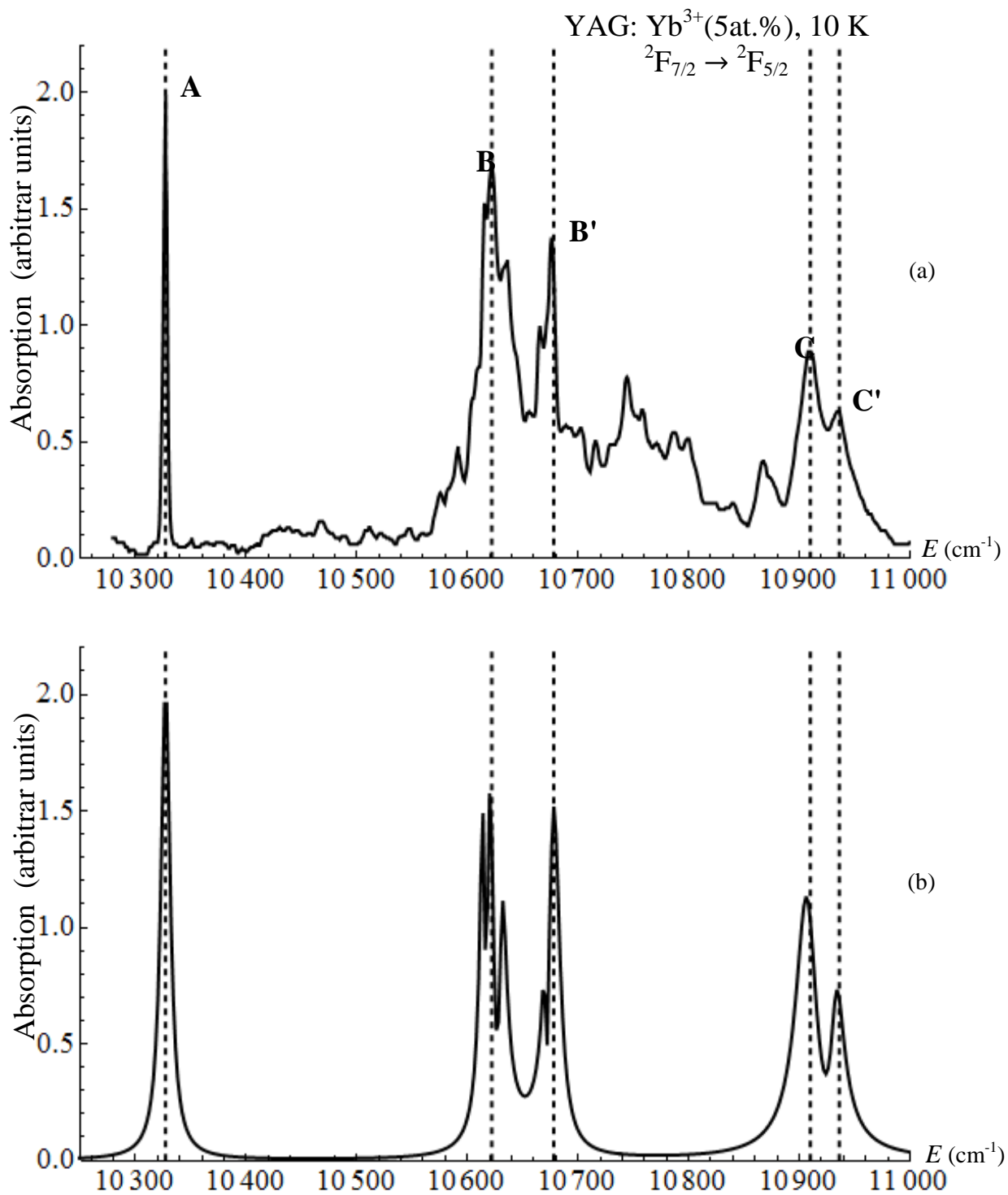


Fig. 5. Spectrul de absorbție la tranziția  $^2F_{7/2}(1) \rightarrow ^2F_{5/2}$  pentru Yb<sup>3+</sup> (5at.%) în YAG la 10 K (a) și modelarea teoretică a formei liniei (b).

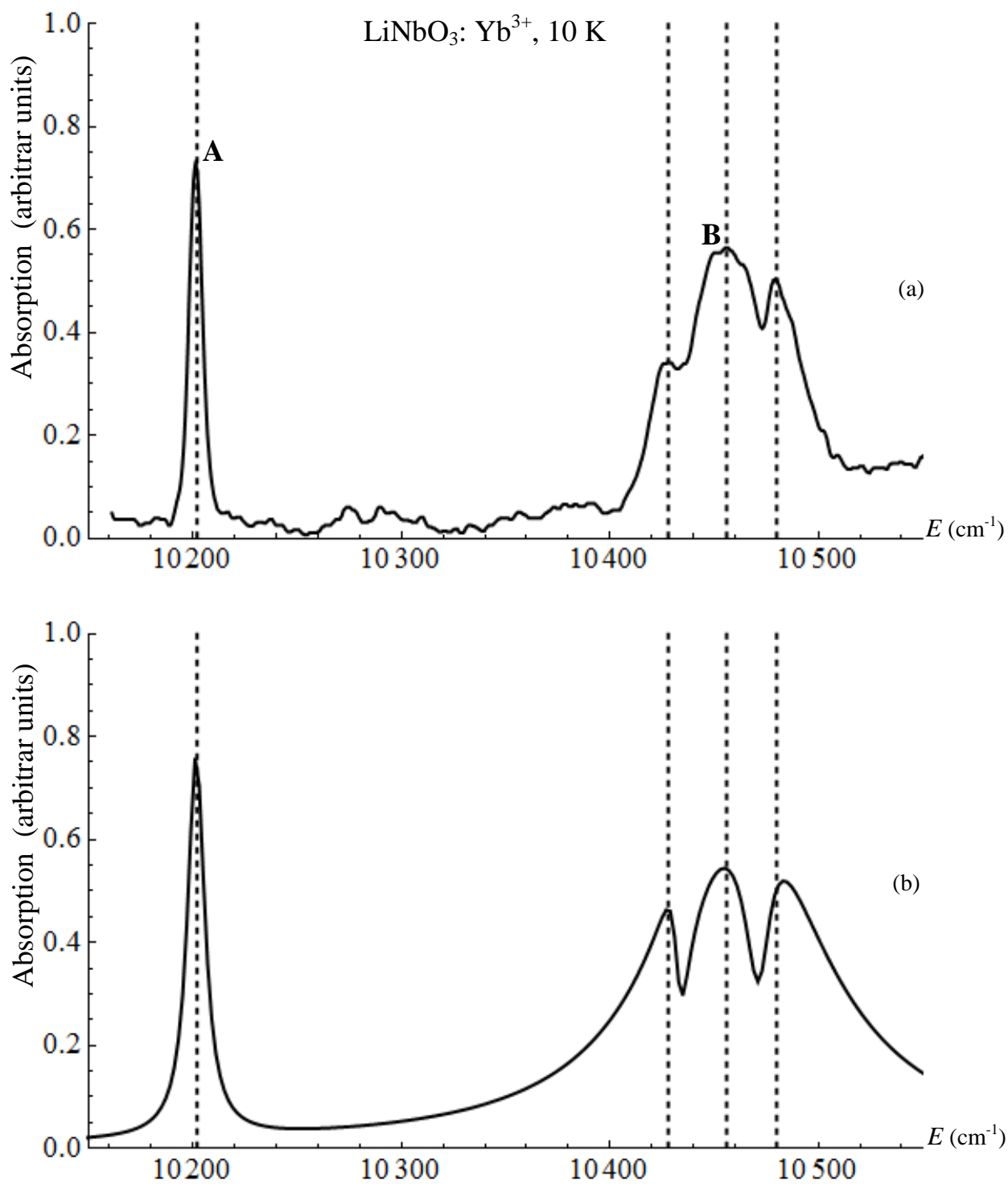


Fig.6. Spectrul de absorbție al  $\text{Yb}^{3+}$ (0.2at.%) în  $\text{LiNbO}_3$  la 10 K (a) și modelarea teoretică a formei liniei (b).

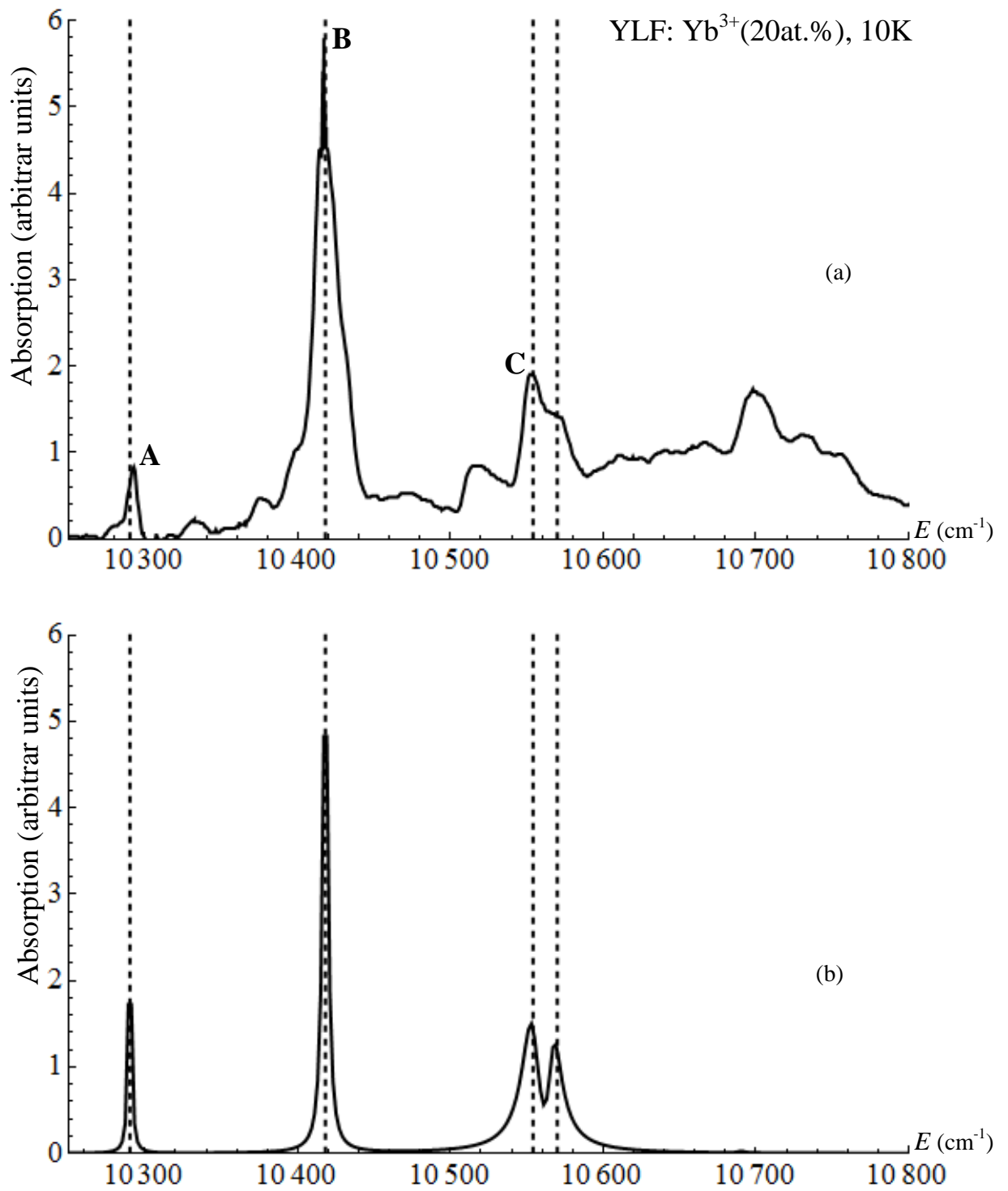


Fig. 7. Spectrul de absorbție polarizat pentru Yb<sup>3+</sup>(20at.%) în YLF la 10 K (a) și modelarea teoretică a formei liniei (b).

## CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

1. Este elaborată aplicația adaptiv-parametrică cu utilizarea softurilor Wolfram Mathematica și Oracle Application Express pentru determinarea stărilor vibraționale ale moleculei de fullerene și pentru modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământuri rare în cristale laser. Această aplicație posedă o interfață web destinată specialiștilor în domeniul fizicii, fără cunoștințe în programare și tehnologii informaționale. Termenii utilizați în interfața web și descrierea lor amănunțită sunt din domeniul fizicii.
2. Forma liniei de absorbție pentru ionul  $C_{60}^{-1}$  este determinată de rezonanța electron-vibrațională. Pentru prima dată s-a constatat că lărgimea structurilor obținute depinde de frecvența tranziției radiative spontane. Frecvențele oscilațiilor proprii ale ionului  $C_{60}^{-1}$  cu simetria  $D_{5d}$  au fost obținute prin metoda reducției grupului icosaedral  $I_h$  către grupul  $D_{5d}$ , folosind datele experimentale pentru oscilațiile fullerenui neutru.
3. Compararea rezultatelor teoretice pentru  $C_{60}$  cu datele experimentale obținute de diferiți cercetători indică o bună concordanță a datelor. Oscilațiile cu frecvențe mai mici aduc un aport mai mare în abaterea de la valorile experimentale. Astfel, modelul teoretic propus reduce vibrațiile de frecvență joasă și mărește cele cu frecvență înaltă.
4. Este aplicat, în cazul cel mai general, transferul rezonant de energie între patru centre în formalismul hamiltonianului interacțiune multipolară a ionilor cu componenta transversală a câmpului electromagnetic local.
5. Este modelată interacțiunea electron-fononică de rezonanță pentru ionul de  $Yb^{3+}$  în trei cristale laser diferite. Compararea rezultatelor numerice obținute pentru forma liniilor de absorbție cu spectrele experimentale indică o bună concordanță a tranziției  ${}^2F_{7/2}(1) \rightarrow {}^2F_{5/2}$  pentru  $Yb^{3+}(5at.%)$  în YAG, a unei părți a spectrului de absorbție al  $Yb^{3+}(0.2at.%)$  în  $LiNbO_3$  la 10 K și a spectrului de absorbție polarizat pentru  $Yb^{3+}(20at.%)$  în YLF la 10 K. Totodată, îmbunătățirea calculelor parametrice pentru câmpul cristalin are o semnificație limitată în astfel de cazuri, deoarece deplasările induse de cuplajul electron-fononic ar putea depăși precizia calculelor numerice.
6. Metalele pământuri rare posedă proprietăți unice și prezintă interes sporit pentru calculul cuantic, fiind recomandate pentru realizarea dinamicii controlate care permite implementarea porților cuantice de  $n$ -biți. Frecvențele exacte ale tranzițiilor optice depind puternic de câmpurile electrice înconjurătoare, iar combinația dintre benzile spectrale omogene înguste și

extinderea neomogenă semnificativă într-un interval mare de frecvențe oferă pentru cercetările ulterioare diferite posibilități de adaptivitate parametrică.

7. Se recomandă a folosi aplicația adaptiv-parametrică pentru asistența utilizatorilor finali în soluționarea a două familii de probleme: determinarea stărilor vibraționale ale moleculei de fullerene și modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământuri rare în diferite cristale laser, precum și la cursurile universitare care conțin proiectarea și crearea aplicațiilor pe calculator.

## BIBLIOGRAFIE

1. Gardiner C. *Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry, and the Natural Sciences* (Springer series in synergetics, vol.13). Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1983. 442 p.
2. van Kampen N.G. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. Dordrecht: Elsevier, 1992. 480 p.
3. Heer B., Maußner A. *Dynamic General Equilibrium Modelling, Computational Methods and Applications*. Berlin-Heidelberg: Springer, 2005. 540 p.
4. Paladi F. *Sisteme complexe: Modele analitice și numerice avansate de tip cluster*. Chișinău: CEP USM, 2005. 174 p.
5. Căpățână Gh. Experiența elaborării sistemelor informatice orientate la problemă. În: *Studia Universitatis*, nr.2. Chișinău: CEP USM, 2007. p.23-28.
6. Caro P. et al. Vibronic optical transitions in inorganic and organic rare earth materials. In: *J. Less. Common. Metals*, vol. 112(1), 1985. p. 153-173.
7. Enaki V., Lupei A., Lupei V., Presura C., Ciobu V. Effects of resonant electron-phonon interactions for the RE<sup>3+</sup> ions in laser crystals. Bellingham, Wash.: SPIE - the International Society for Optical Engineering, vol. 3405, 1998. p.570-577.
8. Perlin Yu. et al. Electron-phonon resonances in the spectrum of a rare-earth impurity ion. In: *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 30 (7), 1979. p. 426-429 (*JETP Lett.*, p. 398-401).
9. Lupei A., Lupei V. Resonance between electronic and vibronic levels of in yttrium aluminium garnet. In: *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 9 (13), 1997. p. 2807-2813.
10. Caro P. et al. Vibronic optical transitions in inorganic and organic rare earth materials. In: *J. Less. Common. Metals*, vol. 112 (1), 1985. p. 153-173.
11. Gerlinger H., Schaack G. Crystal-field states of the Ce<sup>3+</sup> ion in CeF<sub>3</sub>: A demonstration of vibronic interaction in ionic rare-earth compounds. In: *Phys. Rev. B*, vol. 33 (11), 1986. p.7438-7450.
12. Ellens A. et al. Spectral-line-broadening study of the trivalent lanthanide-ion series. I. Line broadening as a probe of the electron-phonon coupling strength. In: *Phys. Rev. B*, vol.55 (1), 1997. p.173-179.
13. Ellens A. et al. Spectral-line-broadening study of the trivalent lanthanide-ion series.II. The variation of the electron-phonon coupling strength through the series. In: *Phys. Rev. B*, vol. 55 (1), 1997. p.180-185.

14. Markushev V.M., Tsaryuk V.I., Zolin V.F. Vibronic luminescence excitation spectra of europium in  $Y_2O_3$  and  $Y_3Al_5O_{12}$ . In: *Opt. Spectrosc.*, vol. 58, 1985. p.356-360.
15. Перлин Ю., Цукерблат Б. *Эффекты электронно-колебательного взаимодействия в оптических спектрах примесных парамагнитных ионов*. Кишинев: Штиинца, 1974. 368 с.
16. Ignatev I., Ovsyankin V. Electron-vibrational shift of f-levels in  $CaF_2$  and  $SrF_2$  crystals with  $Tm^{2+}$  ions. In: *J. Lumin.*, vol. 72-74, 1997. p. 679-680.
17. Paladi F., Ciobu V., Eni N., Primac V. *Procesarea datelor. Studii de caz*. Chişinău: CEP USM, 2016. 120 p.
18. Enachi V., Ciobu V. Oscilații murmurale în particule onionice fullerenice. În: *Buletinul ASM, Seria „Fizică și Tehnică”*, nr.2 (23), 1998. p.13-30.
19. Петрашень М., Трифонов Е. *Применение теории групп в квантовой механике*. Изд. 4-е, стер. Москва: Эдиториал, 2000. 279 с.
20. Enachi V., Ciobu V. Modelul semiclassical și metoda numerică de evaluare a proprietăților electron-fononice în fullerenul  $C_{60}$ . În: *Anale științifice ale USM. Seria „Științe fizico-matematice”*, 1999. p.117-118.
21. Weeks D., Harter W. Rotation-vibration spectra of icosahedral molecules. II. Icosahedral symmetry, vibrational eigenfrequencies, and normal modes of buckminsterfullerene. In: *J.Chem. Phys.* vol. 90 (9), 1989. p.4744-4771.
22. Snyman J. *Practical Mathematical Optimization: An Introduction to Basic Optimization Theory and Classical and New Gradient-Based Algorithms*. Springer Publishing. 2005.257 p.
23. Hou J. et al.  $C_{60}$ -based materials. *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology* (Edited by H.S.Nalwa) 1, 2004. p. 409-474.
24. Menendez J., Page J. Vibrational spectroscopy of  $C_{60}$ . *Light Scattering in Solids VIII*. Berlin/Heidelberg: Topics in Applied Physics (Eds. M.Cardona and G.Guntherodt), Springer Verlag, vol.76, 2000. p.27-95.
25. Adams G. et al. Polymerized  $C_{60}$  Studied by First Principles Molecular Dynamics. In: *Phys. Rev. B*, vol. 50 (23), 1994. p.17471-17479.
26. Adams G. et al. In: First-principles quantum molecular-dynamics study of the vibrations of icosahedral  $C_{60}$ . *Phys. Rev. B*, vol. 44 (8), 1991. p.4052-4055.
27. Giannozzi P., Baroni S. Vibrational and dielectric properties of  $C_{60}$  from density-functional perturbation theory. In: *Chem. Phys.* vol.100 (11), 1994. p.8537-8539.
28. Quong A., Pederson M., Feldman J. First principles determination of the interatomic force-constant tensor of the fullerene molecule. In: *Solid State Commun.* vol. 87 (6), 1993. p.535-539.
29. Wang X.Q., Wang C.Z., Ho K.M. First-principles study of vibrational modes in icosahedral  $C_{60}$ . In: *Phys. Rev. B*, vol. 48 (3), 1993. p.1884-1887.
30. Weeks D., Harter W. Vibrational frequencies and normal modes of buckminsterfullerene. In: *Chem. Phys. Lett.*, vol.144 (4), 1988. p.366-372.

31. Parker S. et al. Complete assignment of the vibrational modes of  $C_{60}$  by inelastic neutron scattering spectroscopy and periodic-DFT. In: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol.13 (17), 2011. p.7789-7804.
32. Akselrod L. et al. A Raman analysis of  $C_{60}$  at low temperatures: a study of molecular and crystal-field effects. In: *Chem. Phys.* 192 (3), 1995. p. 307-317.
33. Bowmar P. et al. Raman and infrared determination of vibrational fundamentals of single-crystal  $C_{60}$  and derivatives and of  $C_{70}$ . In: *J.Phys. Condens. Matter*, vol.6 (17), 1994. p. 3161-3170.
34. Brockner W., Menzel F. Genetic relationship between intrinsic Raman and infrared fundamental vibrations of the  $C_{60}$  and  $C_{70}$  fullerenes. In: *J.Mol.Struct.*, vol. 378 (2), 1996. p.147-163.
35. Dong Z. et al. Observation of higher-order Raman modes in  $C_{60}$  films. In: *Phys. Rev. B*, vol. 48 (4), 1993. p.2862-2865.
36. Graja A., Łapiński A., Król S. Silent and higher-order vibrations of  $C_{60}$  and its compounds. In: *J.Mol.Struct.*, vol. 404, 1997. p.147-156.
37. Martin M. et al. Observation and assignment of silent and higher-order vibrations in the infrared transmission of  $C_{60}$  crystals. In: *Phys. Rev. B*, vol.50 (1), 1994. p.173-183.
38. Schettino V. et al. The Vibrational Spectrum of Fullerene  $C_{60}$ . In: *J.Phys.Chem.A*, vol. 105 (50), 2001. p.11192-11196.
39. Wang K. et al. Observation of higher-order infrared modes in solid  $C_{60}$  films. In: *Phys. Rev. B*, vol. 48 (15), 1993. p.11375-11380.
40. Che J., Çagin T., Goddard III W.A. Studies of fullerenes and carbon nanotubes by an extended bond order potential. In: *Nanotechnology*, vol. 10 (3), 1999. p. 263-268.
41. Refson K., Tulip P., Clark S. Variational density-functional perturbation theory for dielectrics and lattice dynamics. In: *Phys. Rev. B*, vol.73 (15), 2006. p. 155114.
42. Prylurskyy Yu. et al. Structure and thermophysical properties of fullerene  $C_{60}$  aqueous solutions. In: *Int. J. Thermophys.*, vol. 22 (3), 2001. p. 943-956.
43. Adamenko I. et al. Equation of state for  $C_{60}$  fullerene aqueous solutions. In: *Int. J. Thermophys.* vol. 26 (3), 2005. p. 795-805.
44. Enaki V. et al. Effects of resonant electron-phonon interactions for the  $RE^{3+}$  ions in laser crystals. In: *Proceeding of SPIE. Fifth Conference in Optics. ROMOPTO'97*, vol. 3405, Sept 9-12, 1997. p.570-577.
45. Lupei A. et al. Electron-phonon coupling effects on  $Yb^{3+}$  spectra in several laser crystals. In: *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 11 (18), 1999. p. 3769-3778.
46. Ciobu V. Modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământ rar în cristale laser. În: *Revista științifică a Universității de Stat din Moldova „Studia Universitatis Moldaviae” (Seria Fizică, cat. B)*, nr.2 (92), 2016. p.3-10.
47. Ciobu V. Influența rezonanței electron-fononice asupra spectrelor de împrăștiere Raman și asupra spectrelor de absorbție a luminii în cristale dopate cu ioni pământ-rar. În: *Analele Științifice ale USM Seria „Științe fizico-matematice”*, 2003. p.53-55.

**LISTA LUCRĂRILOR  
ȘTIINȚIFICE, ȘTIINȚIFICO-METODICE ȘI DIDACTICE**

**LUCRĂRI ȘTIINȚIFICE**

- **Articole în reviste de circulație internațională (cotate ISI și SCOPUS)**
  1. Candu C., Ciobu V., Enaki V. Four-center resonance energy transfer in rare earth doped crystals. In: Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, ISSN 1454-4164, Vol.7, No. 2, INOE 2000, Bucuresti, April 2005. p.781–786, ISI Impact Factor = 0,563.
  2. Enaki V., Lupei A., Lupei V., Presura C., Ciobu V. Effects of resonant electron-phonon interactions for the RE<sup>3+</sup> ions in laser crystals. Bellingham, Wash.: SPIE – the International Society for Optical Engineering, ISSN: 0277786X, ISBN: 9780819428578 [0819428574], 1998. p.570-577, ISI Impact Factor = 0,2.
- **Articole în reviste științifice cu recenzii din Registrul național al revistelor științifice:**

***Categoria B***

  3. Ciobu V. Modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământ rar în cristale laser. În: Revista științifică a Universității de Stat din Moldova „Studia Universitatis Moldaviae” (Seria „Fizică”), nr.2 (92), 2016. p.3–10.
  4. Boguș I., Ciobu V., Paladi F. Algoritmii de obținere a deplasărilor simetrizate în sistemele simetrice complexe prin reducerea la problema vectorilor proprii. În: Revista științifică a Universității de Stat din Moldova „Studia Universitatis Moldaviae” (seria „Fizică”), nr.7 (87), 2015. p.3–8.
  5. Ciobu V. Elaborarea sistemului informațional național adaptiv pentru automatizarea proceselor testării tehnice al vehiculelor. În: Revista științifică a Universității de Stat din Moldova „Studia Universitatis Moldaviae” (seria „Informatica”), nr.2 (82), 2015. p.3-9.
  6. Ciobu V., Paladi F., Căpățână Gh. Sistem informatic adaptiv „Determinarea stărilor proprii ale moleculelor de fullerene”. În: Revista științifică a Universității de Stat din Moldova „Studia Universitatis Moldaviae” (seria „Informatica”), nr.2 (82), 2015. p.10-15.
  7. Enachi V., Ciobu V. Oscilații murmurale în particule onionice fullerenice. În: Buletinul ASM, Seria „Fizica și Tehnica”, Nr.2 (23), 1998. p.13-30.
- **Articole în culegeri naționale**
  8. Paladi F., Ciobu V. Aplicații adaptiv-parametrice în fizica teoretică. În: Progresele Fizicii Teoretice (coord.: V.Canțer, F.Paladi, D.Nica, ISBN 978-9975-71-817-2), Chișinău, 2016. p.230-261.
  9. Enachi V., Isacova C., Ciobu V. Influența rezonanței electron-fononice asupra liniei de absorbție a luminii în ionul de fullerene C<sub>60</sub><sup>-1</sup>. În: Anale științifice ale USM Seria „Științe fizico-matematice”, Chișinău, 2005. p.62-71.



10. Ciobu V. Influența rezonanței electron-fononice asupra spectrelor de împrăștiere raman și asupra spectrelor de absorbție a luminii în cristale dopate cu ioni pământ-rar. În: Analele științifice ale USM, Seria "Științe fizico-matematice". Chișinău, 2003. p.53-55.
  11. Enachi V., Ciobu V. Transfer de energie în cristale dopate cu ioni de pământ-rar. În: Analele științifice ale USM Seria „Științe fizico-matematice”. Chișinău, 2003. p.56-61.
  12. Zatic D., Ciobu V., Enachi V. Efectele interacțiunii electron-fononice rezonante la împrăștierea neutronilor în cristale ce conțin ioni RE<sup>3+</sup>. În: Anale științifice ale USM Seria „Științe fizico-matematice”. Chișinău, 2002. p.179-182.
  13. Enachi V., Ciobu V. Celule logice CNOT ale computerului cuantic bazate pe molecule fullerene activate și dopate. În: Anale științifice ale USM Seria „Științe fizico-matematice”. Chișinău, 2001. p.106-108.
  14. Enachi V., Ciobu V. Modelul semiclassical și metoda numerică de evaluare a proprietăților electron-fononice în fullerenul C<sub>60</sub>. În: Anale științifice ale USM Seria „Științe fizico-matematice”. Chișinău, 1999. p.117-118.
- **Materiale la forurile științifice internaționale și naționale cu participare internațională**
    15. Ciobu V., Bogush I., Paladi F. Modeling molecular vibrations and spectra of fullerene C<sub>60</sub>. In: 8th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics (MSCMP 2016). Book of abstracts. Chisinau, Moldova, 12-16 September 2016. p.60.
    16. Eni N., Ciobu V., Paladi F. Proiectarea formelor pentru introducerea documentelor în sistemul informatic „e-Admiterea” la USM. În: Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare” cu prilejul aniversării a 70 de ani de la fondarea Universității de Stat din Moldova. Rezumatele comunicărilor. USM, Chisinau, Moldova, 28-29 septembrie 2016. p.245-249.
    17. Ciobu V., Boguş I., Paladi F. Modelarea spectrului de oscilație în sisteme simetrice cu multe grade de libertate. În: Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare” cu prilejul aniversării a 70 de ani de la fondarea Universității de Stat din Moldova. Rezumatele comunicărilor. Chișinău: CEP USM, 28–29 septembrie 2016. p.242-245.
    18. Ciobu V. Distributed adaptive information system for the management of technical testing of automobiles. În: Conferința Internațională: Mathematics & IT: Research and Education (MITRE-2015). Centrul de Educație și Cercetare în Matematică și Informatică (CECMI). Chișinău. p. 92-94. ISBN 978-9975-71-678-9.
    19. Ciobu V., Paladi F. Synchronization of distributed databases. În: Conferința internațională: Mathematics & IT: Research and Education (MITRE-2015). Centrul de Educație și Cercetare în Matematică și Informatică (CECMI). p.94-95. ISBN 978-9975-71-678-9.

20. Ciobu V. Aplicații adaptive pentru cercetarea sistemelor fizice și managementul resurselor. În: Conferința Științifică Națională cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare”. Chișinău: CEP USM, 2014. p.121-123.
- **Materiale la forurile științifice internațională (peste hotare)**

21. Candu C., Ciobu V., Enaki V. Theory of four-center systems for energy transfer in rare-earth doped materials. In: 7<sup>th</sup> International Conference on Physics of Advanced Materials, June 10-12, 2004, Section Optical and Photoelectric Properties. Universitatea Alexandru Ioan Cuza (UAIC) Iași, Romania. p.60.

22. Candu C., Ciobu V., Enaki V. Theory of resonant electron-phonon interaction for energy pooling in rare-earth doped materials. In: 7<sup>th</sup> International Conference on Physics of Advanced Materials, June 10-12, 2004, Section Optical and Photoelectric Properties. Universitatea Alexandru Ioan Cuza (UAIC) Iași, România. p.166.

23. Enachi V., Ciobu V., Bazalic Z. Exhibitions of electron-phonon interaction in  $C_{60}$  fullerene. În: Conferința Națională de Fizică. Constanța, România, 1998. p.161.

24. Enachi V., Ciobu V. Problema inversă vibrațională în fulereni. În: Materialele Sesiunii a V-a științifică a cadrelor didactice. Iași, România, 1996.
  - **Materiale la forurile științifice naționale**

25. Ciobu V. Электрон-фононный резонанс в ионах фуллерена  $C_{60}^{-1}$ . În: Conferința corpului didactico-științific „Bilanțul activității științifice a USM pe anii 1998-99”, 27 septembrie-2 octombrie 2000. p. 194-195.

26. Ciobu V., Gribovan V., Enachi V. Влияние резонансного электрон-фононного взаимодействия на рамановское рассеяние света примесными редкоземельными ионами. În: Conferința corpului didactico-științific „Bilanțul activității științifice a USM pe anii 1998-99”, 27 septembrie-2 octombrie 2000. p.192-193.

27. Enachi V., Ciobu V. Mecanismul Jahn-Teller de imperechere a electronilor în anionii  $C_{60}^{-n}$ . În: Conferința corpului didactic USM, 1995. p.73.
  - **Brevete de invenții, patente, certificate de înregistrare, materiale la saloanele de invenții**

28. Ciobu V., Primac V. Certificat de înregistrare a obiectelor dreptului de autor și drepturilor conexe, Sistemul automatizat de evidență și căutare a unităților de transport supuse testării tehnice ”AutoTEST”, Seria PC Nr.3554 din 05.12.2012 înregistrat în baza de date a Agenției de Stat pentru Proprietatea Intelectuală a Republicii Moldova.

## LUCRĂRI DIDACTICE

- **Culegere de probleme și îndrumări metodice**

29. Paladi F., Ciobu V., Eni N., Primac V. Procesarea datelor. Studii de caz (ISBN 978-9975-71-801-1). Chișinău: CEP USM, 2016. 120 p.

30. Ciobu V., Eni N. Limbajul SQL: Culegere de probleme și îndrumări metodice (ISBN 978-9975-71-753-3). Chișinău, CEP USM, 2016. 87 p.

## ADNOTARE

la teza de doctor „*Modelarea adaptiv-parametrică a unor sisteme fizice complexe*”, specialitatea 131.04 – *Fizică computațională și modelarea proceselor*, prezentată de Victor CIOBU, Universitatea de Stat din Moldova, Chișinău, 2016, pentru a obține titlul de doctor în științe fizice

**Structura tezei:** Teza constă din introducere, trei capitole, concluzii și recomandări, bibliografie ce cuprinde 173 titluri. Lucrarea conține 25 figuri, 7 tabele, 5 anexe și este expusă pe 172 pagini (131 pagini text de bază). Rezultatele obținute sunt publicate în 20 de lucrări științifice.

**Cuvinte-cheie:** fullerene, ioni de pământuri rare, interacțiune electron-vibrațională, interacțiune electron-fononică, modelare, aplicație adaptivă, sistem complex.

**Domeniul de studiu** îl constituie aspectele teoretice și aplicative de modelare pe calculator și de dezvoltare a aplicațiilor adaptive în cercetarea sistemelor fizice complexe.

**Scopul și obiectivele** lucrării rezidă în dezvoltarea modelelor teoretice și a tehnicilor de elaborare a aplicațiilor adaptive pentru modelarea pe calculator a vibrațiilor moleculare și a spectrelor de oscilație în sisteme simetrice complexe cu multe grade de libertate, determinarea stărilor proprii ale moleculei și ionului de fullerene, a interacțiunii electron-fononice în cristale dopate cu ioni de pământ rar, compararea rezultatelor teoretice obținute cu datele experimentale, fiind determinat astfel setul de valori corespunzătoare ale parametrilor modelelor fizice aplicate.

**Noutatea și originalitatea științifică a rezultatelor obținute.** A fost calculat spectrul de oscilații al moleculei de fullerene în baza algoritmului propus. A fost arătat că lărgimea liniei de absorbție pentru ionul de fullerene depinde de probabilitatea tranziției radiative spontane. A fost simulată pe calculator interacțiunea electron-fononică de rezonanță în cadrul aplicației adaptive elaborate.

**Problema științifică importantă soluționată** constă în modelarea vibrațiilor moleculare și a spectrelor de oscilații în sisteme fizice simetrice cu multe grade de libertate, în determinarea stărilor proprii ale moleculei și ionului de fullerene, precum și în modelarea interacțiunii electron-fononice în cristale dopate cu ioni de pământuri rare pe baza aplicației adaptive.

**Semnificația teoretică** a tezei își găsește exprimare în elaborarea unui algoritm de descompunere a reprezentării mecanice a sistemului în reprezentări ireductibile, precum și în studiul transferului rezonant de energie între patru centre în formalismul hamiltonianului multipolar de interacțiune a ionilor. De asemenea, a fost propusă și implementată aplicația adaptivă pentru asistența modelării pe calculator a două probleme fizice.

**Valoarea aplicativă** a lucrării este determinată, în primul rând, de faptul că aplicația adaptivă este utilizată pentru determinarea stărilor vibraționale ale moleculelor de fullerene și pentru modelarea interacțiunii electron-fononice de rezonanță pentru ionii de pământuri rare în diferite cristale laser, precum și de faptul că a fost validată însăși metoda de elaborare a aplicațiilor adaptive pentru asistența soluționării pe calculator a problemelor din fizica sistemelor complexe.

**Implementarea rezultatelor:** Rezultatele obținute sunt utilizate în cadrul Proiectului instituțional de cercetări științifice fundamentale 15.817.02.29F, direcția strategică „Materiale, tehnologii și produse inovative”. Cercetările respective sunt reflectate, de exemplu, și în curriculele cursurilor universitare „Fizica clusterilor” și „Modelarea sistemelor complexe” ținute la Universitatea de Stat din Moldova); ele își găsesc reflectarea și în procesul de proiectare și creare a aplicațiilor pe calculator.

## АННОТАЦИЯ

Докторская работа „Адаптивно-параметрическое моделирование некоторых сложных физических систем” по специальности 131.04 – *Вычислительная физика и моделирование процессов*, представлена Виктором ЧОБУ, Государственный университет Молдовы, Кишинев, 2016, для получения степени доктора физических наук

**Структура диссертации:** Диссертация состоит из введения, трех глав, выводов и рекомендаций, литературы, содержащей 173 наименования. Работа содержит 25 рисунков, 7 таблиц, 5 приложений, изложена на 172 страницах (из них 131 страниц основного текста). Результаты, представленные в диссертации, опубликованы в 20 научных работах.

**Ключевые слова:** фуллерены, ионы редкоземельных элементов, электрон-колебательное взаимодействие, электрон-фононное взаимодействие, моделирование, адаптивные приложения, сложные системы.

**Область исследований:** теоретические и практические аспекты моделирования и разработки адаптивных приложений в исследовании сложных физических систем.

**Цели и задачи работы:** развитие теоретических моделей и методов разработки адаптивных приложений для моделирования на компьютере колебаний молекул и энергетических спектров сложных симметричных систем со многими степенями свободы, определение нормальных колебаний молекулы и иона фуллерена, электрон-фононное взаимодействие в кристаллах, легированных ионами редкоземельных элементов, сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными и определение на этой основе соответствующего набора параметров прикладных физических моделей.

**Научная новизна и оригинальность полученных результатов.** При помощи предложенного алгоритма был вычислен спектр колебаний молекулы фуллерена. Было показано, что ширина линии поглощения для иона фуллерена зависит от вероятности спонтанного перехода. При помощи разработанного адаптивного приложения был промоделирован на компьютере электрон-фононный резонанс.

**Решённая научная задача** состоит в моделировании колебаний молекул и колебательных спектров в симметричных физических системах с большим количеством степеней свободы, в определении нормальных колебаний молекулы и иона фуллерена, а также в моделировании электрон-фононного взаимодействия в кристаллах, легированных ионами редкоземельных элементов на основе адаптивного приложения.

**Теоретическая значимость работы** состоит, во-первых, в разработке улучшенного алгоритма для разложения механического представления системы на неприводимые представления группы симметрии этой системы; во-вторых – в исследовании резонансного переноса энергии между 4-мя центрами в гамильтоновом формализме мультипольного взаимодействия ионов. Также предложена и разработана адаптивное приложение для моделирования сложных физических задач на компьютере.

**Практическое значение работы** определено, в первую очередь, реализацией адаптивного приложения для определения нормальных колебаний молекулы фуллерена и моделирования резонансного электрон-фононного взаимодействия для ионов редкоземельных элементов в различных лазерных кристаллах, а также проверкой самого метода разработки адаптивных приложений для решения задач сложных физических систем на компьютере.

**Внедрение результатов:** полученные результаты используются в фундаментальных научных исследованиях проекта 15.817.02.29F, стратегическое направление „Материалы, технологии и инновационные продукты”. Эти исследования отражены, например, в учебных планах университетских курсов „Физика кластеров” и „Моделирование сложных систем” читаемых в Государственном университете Молдовы, а также используются при разработке и создании компьютерных приложений.

## SUMMARY

of the doctoral thesis „*Adaptive-parametric modeling of some complex physical systems*”

Specialty 131.04 – *Computational Physics and Process Modeling*,

presented by Victor CIOBU, State University of Moldova, Chisinau, 2016

to obtain title of doctor in the Physical Sciences

**Thesis Structure:** The thesis consists of introduction, three chapters, conclusions and recommendations, bibliography of 173 references. It contains 25 figures, 7 tables, 5 annexes and is carried on 172 pages (131 pages – basic text). The presented results are published in 20 research papers.

**Keywords:** fullerene, rare earth ions, electron-vibrational interaction, electron-phonon interaction, modeling, adaptive application, complex system.

**Field of study** is theoretical and applied computer modeling, and adaptive applications development for the research of complex physical systems.

**Goals and objectives of thesis** are the development of theoretical models and techniques for creating adaptive applications for computer modeling of molecular vibration and spectra in symmetrical complex systems with many degrees of freedom, determining the eigenstates of fullerene molecule and ion, electron-phonon interaction for rare earth ions in laser crystals, comparison of the obtained theoretical results with experimental data, thereby setting up the appropriate values of the parameters in the applied physical models.

**Scientific novelty and originality of the obtained results.** The oscillation spectrum of the fullerene molecule was calculated based on the proposed algorithm. It was shown that the absorption line width of the fullerene ion depends on the probability of spontaneous radiative transition. The resonance electron-phonon interaction was simulated based on the developed adaptive computer application.

**Important scientific solved problem** consists in modeling of the molecular vibration and spectra in the symmetrical physical systems with many degrees of freedom and determination of the eigenstates of fullerene molecule and ion, as well as in modeling of the electron-phonon interaction for rare earth ions in laser crystals based on the adaptive application.

**Theoretical significance** of the thesis is to develop an improved algorithm for decomposition of the mechanical representation of the system into irreducible representations, as well as the study of four-center resonance energy transfer in the formalism of multipolar interaction Hamiltonian of ions. It was also proposed and implemented the adaptive application for assistance in computer modeling of complex physical problems.

**Applicative value** of the work is determined primarily by the development of adaptive application to determine the eigenstates of fullerene molecule and modeling the resonance electron-phonon interaction for rare earth ions in various laser crystals, and the validation of the method itself for drawing the adaptive applications for assistance in computer modeling of problems in the field of physics of complex systems.

**Implementation of results:** the obtained results are used in the institutional fundamental research project 15.817.02.29F, strategic direction „Materials, Technologies and Innovative products.” These investigations are reflected, for example, in the university courses curricula „Physics of Clusters” and „Complex Systems Modeling” held at the Moldova State University, as well as in designing and building of computer applications.

**CIOBU VICTOR**

**MODELAREA ADAPTIV-PARAMETRICĂ  
A UNOR SISTEME FIZICE COMPLEXE**

**131.04 – FIZICĂ COMPUTAȚIONALĂ  
ȘI MODELAREA PROCESELOR**

Autoreferatul tezei de doctor în științe fizice

---

Aprobat spre tipar: 15.12.16  
Hârtie ofset. Tipar ofset.  
Coli de tipar: 2.0

Formatul hârtiei 60×84 1/16  
Tiraj 50 ex.  
Comanda nr. 165/16

---

Centrul Editorial-Poligrafic al USM  
str. A.Mateevici 60, Chișinău MD-2009, Republica Moldova