

Proiect ESFRO
Domeniul

Fizică atomică, moleculară și chimică

Echipa de lucru

- Prof. Ladislau Nagy (UBB, responsabil)
- Prof. Florin Popescu (UB)
- Dr. Viorica Stancalie (INFLPR)
- Prof Vasile Chiș (UBB)
- Dr. Zaharie Moldovan (INCDTIM)

Teme și subiecte de cercetare

I. Studiul teoretic al sturcturii atomilor și moleculelor

1. Calcule de structură atomică; Spectroscopie teoretică și computațională.
2. Interacțiuni intermoleculare (legături de hidrogen, forțe van der Waals, potențiale de interacțiune); suprafețe de energie echipotențiala ale sistemelor moleculare

II. Studiul proprietăților atomilor și moleculelor prin interacțiuni cu câmpul electromagnetic; spectroscopii

1. Spectroscopia de înaltă rezoluție/înaltă sensibilitate
2. Metode spectroscopice pentru studiul structurii și proprietăților atomilor și sistemelor moleculare

III. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpul laser

1. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpuri intense
2. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpul laser
3. Control cuantic cu pulsuri laser, dinamica undelor de materie, informație cuantică
4. Interacțiunile atomilor cu câmpuri electromagnetice slabe.

IV. Ciocniri atomice și moleculare

1. Ciocniri atomice și moleculare cu particule încărcate rapide – teorie
2. Ciocniri electron-atom și electron-molecula - experiment
3. Interacțiunea atomilor și a moleculelor cu fascicul de electroni și pozitroni – teorie

V. Macromolecule și clusteri

1. Macromolecule de interes biologic, polimeri, grafenă: teorie, modelare și simulare
2. Calculul Ab initio al structurii, proprietăților termodinamice și spectroscopice ale clusterilor moleculari. Dinamica moleculara

II. TEME SI SUBIECTE DE CERCETARE

Tema 1: Studiul teoretic al stucturii atomilor și moleculelor

Subiectul 1.1. Calcule de structura atomica. Spectroscopie teoretică și computațională

- Realizari recente si perspective (la nivel international)

Ca parte a spectroscopiei teoretice si computationale, calculele de structura atomica se dovedesc utile pentru numeroase domenii stiintifice, unul dintre acestea fiind fusiunea termonucleara controlata. Structura nivelelor de energie dintr-un sistem atomic, determinarea ratelor de autoionizare, a sectiunilor eficace de excitare, ionizare, de schimb de sarcina sau de recombinare constituie exemple de date atomice obtinute. Calculul opacitatilor se bazeaza pe un formalism nou al ecuatiilor de stare si pe metode *ab initio* de acuratete pentru determinarea nivelelor de energie, a tariilor de oscilator si a sectiunilor eficace de fotoionizare.

Structura atomica este un domeniu in care acuratetea calculelor joaca un rol vital. In spectroscopie, observatiile sunt facute in raport cu diferentele de energie. Aceste diferente trebuie sa prezinte o precizie crescuta. In numeroase aplicatii se cere ca acuratetea sa fie mai mica de 4.5×10^{-6} unitati atomice. Chiar si in cazul unor sisteme atomice sau ionice cu un numar relativ redus de electroni, obtinerea unui ordin de eroare atat de scazut poate ridica probleme de calcul. In cazul elementelor grele, se impune utilizarea unui formalism relativist complet si includerea efectelor de corelatie. Luarea in considerare a corelatiei pentru sistemele cu multi electroni este o sarcina dificila din punct de vedere computational deoarece dimensiunea problemei tinde sa creasca exponential cu numarul de electroni din sistem. Noile tehnologii hardware si software folosite in spectroscopia computationala permit cresterea preciziei de calcul concomitent cu folosirea aproximatiilor adecvate si cu includerea efectelor fizice relevante pentru modelarea unor astfel de sisteme atomice cu multi electroni.

- Contributia romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)

Universitatea Bucuresti (UB)

State of the art

Theoretical and computational spectroscopy is a new research field focused on the study of the interaction between matter and radiation and the extraction of structural and dynamical features of atomic, molecular and supramolecular systems by *in silico* analysis of spectroscopic observables, using a powerful combination of quantum-based theories and sophisticated computer simulations.

The research activity in this area is strongly interdisciplinary, involving physics, chemistry, biology, mathematics and informatics. The main objectives of specific studies are to:

- analyse and explain spectroscopical experimental data (Raman, IR, NMR, ESR, UV-Vis, XRay, XPS, UPS, ellipsometry, EELS, ARPES, STS, I/V transport, etc.)
 - predict properties of new materials, beyond experiments
 - achieve remarkable technological and fundamental breakthroughs, such as new functionality or biological applications
- (i) *In silico* modelling is playing an ever increasing role not only in the fundamental research but also as a tool for studies of technological and social interest [7].

Experimental spectra do not provide direct access to molecular structure and dynamics, and interpretation of the indirect information that can be inferred from analysis of the experimental data is seldom straightforward. Typically, these complications arise from the fact that spectroscopic properties depend on the subtle interplay of several different effects, whose specific roles are not easy to separate and evaluate. For this reason, computational spectroscopy is rapidly evolving from a highly specialized research field into a versatile and fundamental tool for the assignment of experimental spectra and their interpretation in terms of basic physical-chemical processes and has a major impact on drug design, materials science, nanotechnology, and many other research fields [8]. The usefulness of theoretical/computational approaches is directly related to their ability to describe systems/processes of size and complexity comparable to those accessible by experimental techniques, while still providing results as close as possible to “spectroscopic accuracy” [9, 10].

Indeed, the impact of spectroscopic techniques in practical applications is huge, ranging from astrophysics to drug-design and biomedical studies, from the field of cultural heritage to characterizations of materials and processes of technological interest, etc. However, the development of more and more sophisticated experimental techniques poses correspondingly stringent requirements on the quality of the models employed to interpret spectroscopic results, and on the accuracy of the underlying chemical/physical descriptions.

Commercial and non-commercial software is available for performing semiempirical, Hartree-Fock (HF), post-HF and DFT and TD-DFT calculations: Gaussian, Gamess, Turbomole, ADF, AbInit, Crystal, Jaguar, etc.

Objectives

Theoretical and computational spectroscopy can be extremely helpful, essentially at three different levels:

- i. supporting and complementing the experimental results to determine structural, electronic and dynamical features of target molecule(s) starting from spectral properties;
- ii. dissecting and quantifying the role of different effects in determining the spectroscopic properties of a given molecular / supramolecular system;
- iii. predicting electronic, molecular and spectroscopic properties for novel/modified systems.

I) Grupuri si Laboratoare renumite la nivel International

1. **E.J. Reijerse**, Department of Molecular Spectroscopy, University of Nijmegen, Toernooiveld 1, 6525 ED, Nijmegen, The Netherlands [1]
2. **Dante Gatteschi, Roberta Sessoli**, Department of Chemistry, University of Florence, Via Maragliano 75, 0144 Firenze, Italy [2]
3. **PR Reidi and GM Smith**, School of Physics and Astronomy, University of St. Andrews, St. Andrews, HF-EPR Laboratory [3]
4. **M Martinelli, Luca Pardi, CA Massa, G Annino**, HF_EPR Laboratory, Istituto per I processi fisico-chimici , Pisa, Italy [2, 4-10].

Referinte

1. E.J. Reijerse, *High-Frequency EPR Instrumentation*, **Applied Magnetic Resonance**, **37**, 795-818 (2010);
2. D. Gatteschi, L.A. Pardi, *High Frequency EPR Spectroscopy*, Book Series Lecture Notes in Physics, vol. 595, Springer (2002)
3. P.R Reidi and G. Smith , *Progress in High Field EPR: Inorganic Materials*, **Electron Paramagnetic Resonance, The Royal Society of Chemistry**, **19**, 338-373 (2004)
4. *How and Why the Characterization of Magnetic Materials Can Give Directions in the Methodological Development in High Field-High Frequency EPR*. L.C. Brunel, A. Caneschi, A. Dei, D. Friselli, D. Gatteschi, A.K. Hassan, L. Lenci, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, F.F. Popescu, I. Ricci, L. Sorace, **Res. Chem. Intermediats** , **28**, 215-249 (2002)
5. **Florin F. Popescu**, *High Field Effects in EPR Spectroscopy*, www.scitopics.com Materialul a aparut in SciTopics (ELSEVIER) la sectiunea Atomic end Molecular Physics pe 14 aprilie 2010
6. M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, **V. Bercu**, and **F.F. Popescu**, *Relaxation processes in a multilevel spin system investigated by linewidth analysis of the multifrequency EPR spectra*, **Phys. Rev. B**, **67**, 014225, 1-11, (2003)
7. **F.F. Popescu**, M. Martinelli, C.A. Massa , L.A. Pardi , and **V. Bercu**, *Delocalization of spin projection in weak exchange linear chains, evidenced by multi-frequency high-field EPR spectroscopy*, **Magnetic Resonance in Chemistry**, **43**, S215-S220, (2005)
8. **F.F. Popescu**, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, and **V. Bercu**, *Multifrequency Electron Paramagnetic Resonance of Ce^{3+} in $Gd(HBPz_3)_2$ tropolonate complex: High field effects*, **J. Phys: Cond. Matt.** **17**, 5563-5575, (2005).
9. **F.F. Popescu**, **V. Bercu**, J.N. Barascu, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, M. Stefan, **S.V. Nistor**, M. Nikl, and P. Bohacek, *Study of the ground multiplet of Kramers rare earth ions in solid matrices by multifrequency electron paramagnetic resonance spectroscopy: Nd^{3+} in $PbWO_4$ single-crystals*, **Journal of Chemical Physics** **131** Article Number: 034505 (2009).
10. **F.F. Popescu**, **V. Bercu**, J.N. Barascu, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, M. Stefan, **S.V. Nistor**, M. Nikl, *Study of the Kramers rare earth ions ground multiplet with a large orbital contribution by multifrequency EPR spectroscopy: Ce^{3+} in $PbWO_4$ scintillator*, **Optical Materials** **32** 570–575 (2010).

International groups. The most important international groups whose research activity is focused on theoretical and computational chemistry led by:

Carlo Adamo, Ecole Nationale Supérieure de Chimie, Paris, France

Vicenzo Barone, Scuola Normale Superiore di Pisa, Italy

Stephan Grimme, University of Muenster, Germany

Gino DiLabio, University of Alberta, Department of Physics, Edmonton, Canada

These groups particularly involved in developing new concept and models in theoretical chemistry, to develop scientific software and benchmark Hartree-Fock and/or DFT calculations.

References

1. Barone V, Cimino P, Pedone A, *MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY* Volume: 48 Special Issue: Sp. Iss. 1 Pages: S11-S22, 2010
2. Quantum mechanical computations and spectroscopy: From small rigid molecules in the gas phase to large flexible molecules in solution, Barone V, Improta R, Rega N, *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH* Volume: 41 Issue: 5 Pages: 605-616, 2008
3. Theoretical thermodynamics for large molecules: Walking the thin line between accuracy and computational cost, Schwabe T, Grimme S, *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH* Volume: 41 Issue: 4 Pages: 569-579, 2008
4. Dispersion interactions in density-functional theory, Johnson ER, Mackie ID, DiLabio GA, *JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY*, Volume: 22 Issue: 12 Pages: 1127-1135, 2009

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR)-Magurele

Pe parcursul ultimilor ani *INFLPR* a contribuit si s-a implicat in obtinerea de date atomice de interes pentru diverse domenii. Performantele obtinute in utilizarea celor mai de acuratete metode si modele de studiu al interactiunii electron-atom/ion, au determinat includerea grupului intr-un contract de cercetare coordonat de *IAEA* care are ca scop identificarea, si recomandarea comunitatii stiintifice internationala, a celor mai corecte date atomice de structura, si a sectiunilor eficiente de excitare prin impact electronic. Prin profilul activitatii grupul a adus importante contributii in contextul colaborarii *EURATOM*.

Ca obiective de viitor, grupul are in vedere modelari teoretice de acuratete (Dirac R-matrix si Breit-Pauli) in scopul determinarii de tarii de ciocnire in cazul excitarilor prin impact electronic. Date vor fi obtinute pentru e^-Ar , C si B si ionii lor. Acest obiectiv se contureaza in contextul colaborarilor cu *ADAS*, *IAEA* si *ITM-ISIP*. De asemenea, se urmareste realizarea de documentatii si updatari pentru codurile AMNS (atomic, molecular, nuclear and surface physics) din cadrul *ITM*.

- **Referinte (selectie relevanta)**

1. **Stancalie V**, *Forbidden transitions in excitation by electron impact in Co³⁺: an R-matrix approach*, Phys. Scr. 83(2011)025301
2. **Stancalie V**, Burke V.M. , Sureau A., *Forbidden transitions in excitation by electron impact in Li-like Al* Phys. Scr. 59(1999)52.
3. **Stancalie V.**, „*Fine structure atomic data calculation for Al XI*” Phys. Scr. 61(2000)459
4. **Stancalie V, Pais V**, „ *Effective collision strengths for electron impact excitation of Al¹⁰⁺*, Laser and Particle Beams 24(2006)235
5. P.G. Burke, V.M. Burke, A. Hibbert, B.M. McLaughlin, C.J. Noble, C.A. Ramsbottom, M.P. Scott, **V. Stancalie** „ *Electron impact excitation of Fe-peak elements for astrophysical interest*” 2006, ICAMDATA,
6. **Stancalie V.**, „*Theoretical atomic data for plasma spectroscopy*” Laser and Particle Beams 27(2009)345-354.
7. **Stancalie V, Mihailescu A.**, „*Complex atoms modelling for plasma diagnostics*” J.O.A.M. 7(2005)2413-20

Universitatea Babeş-Bolyai si Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare (UBB si ITIM)-Cluj

Other two important research physicists groups activating in this field have been identified in Romania, at Babeş-Bolyai University and National Institute for Research and Development of Isotopic and Molecular Technologies [1-5]. Also, prof. Gîrţu from Ovidius University Costanţa leads a group where such computational chemistry studies are usually performed [6].

1. **V.Chiş**, Molecular and Vibrational Structure of 2,4-Dinitrophenol: FT-IR, FT-Raman and Quantum Chemical Calculations; Chemical Physics; 300; 1-11; 2004;
2. **T.A. Beu**, A. Jurjiu, "Radiation-induced fragmentation of fullerenes", Phys. Rev. B 83, 024103 (2011)
3. **T.A. Beu**, J. Onoe, "First-principles calculations of the vibrational spectra of one-dimensional C₆₀ polymers", Phys. Rev. B 74, 195426 1-6 (2006).
4. **V. Chiş**, M. M. Venter, N. Leopold, O. Cozar; Raman, surface-enhanced Raman scattering and DFT study of para-nitro-aniline; Vibrational Spectroscopy; 48, 210-214 2008
5. Morari, C., Bogdan, D., **Turcu, I.**, A first-principles study of π -conjugated thiol phenothiazine derivatives adsorbed on Au(111) surface, Central European Journal of Physics, 7 (2), pp. 332-339, 2009
6. Oprea CI, **Damian A**, Girtu MA, Theoretical study of neutral and reduced hexacyanobutadiene JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM Volume: 804 Issue: 1-3 Pages: 111-116, 2007

Subiectul 1.2. Interacţiuni intermoleculare (legături de hidrogen, forţe van der Waals, potenţiale de interacţiune); suprafeţe de energie echipotenţiala ale sistemelor moleculare

- **Realizari recente si perspective (la nivel international)**

The potential energy surface (PES) plays a central role in the theory and computational simulation of virtually all types of molecular interactions of interest to chemists and physical chemists especially. Nowadays, it becomes clear that a highly accurate (high-level ab initio-based) full-dimensional global PESs are desirable for a full understanding of structure and dynamics of stable and reactive molecules and molecular complexes.

In many applications it is necessary to adopt the well-established procedure of proposing or calculating a potential energy function that describes the energy of the system as a function of the positions of the atoms and then to study the motion of the system by classical mechanics (molecular dynamics), to sample the energy at random configurations and average them to obtain static properties (Monte Carlo), or to explore the surface (the energy landscape) to find the energy minima.

For an accurate evaluation of the non-bonded interactions energy, calculations covering a large portion of the correlation energy combined with extended AO basis sets are required. Chemical accuracy (≈ 1 kcal/mol) can be obtained by performing the coupled-cluster CCSD(T) calculation in combination with the complete basis set (CBS) limit extrapolations.

International groups

Pavel Hobza, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry Prague, Czech Republic

Stephan Grimme, University of Muenster, Germany

Gino DiLabio, University of Alberta, Department of Physics, Edmonton, Canada

Donald G. Truhlar, University of Minnesota, USA

Brian J Howard, Pembroke College, University of Oxford, UK

Chris Hunter, University of Sheffield, UK

Contributie Romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)

Universitatea Babeș-Bolyai, Cluj

Institutul National pentru Tehnologii Moleculare, ITIM Cluj

Ioan Turcu, Attila Bende, Cristian Morari, INCDTIM Cluj-Napoca

Titus Beu, Vasile Chiș, Babeș-Bolyai University, Cluj-Napoca

In the past 20 years, we have witnessed an enormous growth of interest in the fast and accurate calculation of intermolecular interactions. The reason for such an interest should be sought in the role that noncovalent interactions are playing in both bio- and nanostructures.

Despite being usually identified as weak forces, non-covalent interactions play a relevant role in many physico-chemical processes like, e.g., folding of bio-molecules, supra-molecular assembly, molecular recognition, solvation phenomena, crystal packing, etc. [Hob10]. The function of biomacromolecules is to a large extent determined by their structures, so forming a deep understanding of the nature of the stabilization of these systems is thus of crucial importance.

Besides CC method, all other WFT, DFT, and EP approaches contain one or more parameters and their performance for noncovalent interactions is limited. For example, the most popular among these methods, the second-order Møller-Plesset perturbation theory, strongly overestimates the dispersion energy, which causes difficulties in the description of dispersion-bound complexes.

DFT calculations are much faster than correlated WFT calculations and do not depend so heavily on the basis set size; furthermore, additional speedups can be gained by using GGA functionals instead of hybrid ones.

On the other hand, the drawback of both local and semilocal DFT methods, is that they do not describe the dispersion energy. Fortunately, very recent advances in DFT led to specific approaches which account for van der Waals (vdW) interactions. Such methods were derived by explicitly including an attractive dispersion term (DFT-D methods), double hybrid functionals [Gri06], by using parametrized functionals [Zha08], or by developing dispersion-correcting potentials (DCP methods) [DiL08]. All these advancements were fueled by a growing appreciation of the importance of London dispersion for virtually all applications, mainly in biology and nanostructures and such methods are increasingly applied for studying weak intermolecular interactions.

Computer simulations of molecular materials require a compact but accurate description of the energies of interacting molecules and the forces between them [Sto09].

Another class of PESs, which is far more demanding to represent mathematically, are those for chemical reactions. In this case, simple functional forms are highly problematic, and other approaches are often taken [Bow10].

Objectives

The main challenges in this field are:

- i. to design, implement and benchmark methodologies for calculating weak intermolecular interactions
- ii. to accurately describe the potential energy surfaces of single molecules as well as molecular clusters
- iii. to obtain reliable intermolecular potentials for a wide range of applications in molecular science.

References

- Hob10 Stabilization and Structure Calculations for Noncovalent Interactions in Extended Molecular Systems Based on Wave Function and Density Functional Theories, Kevin E. Riley, Michal Pitonak, Petr Jurecka, Pavel Hobza, *Chem. Rev.* 2010, 110, 5023–5063
- Gri06 Semiempirical hybrid density functional with perturbative second-order correlation, S. Grimme, *J. Chem. Phys.* 124 (2006) 034108.
- Zah08 Validation of Dispersion-Corrected Density Functional Theory Approaches for Ionic Liquid Systems, S. Zahn, B. Kirchner, *J. Phys. Chem. A* 112 (2008) 8430-8435.
- DiL08 Accurate treatment of van der Waals interactions using standard density functional theory methods with effective core-type potentials: Application to carbon-containing dimers, G. A. DiLabio, *Chem. Phys. Lett.*, 455 (2008) 348-353.

- Bow10 Ab initio-based Potential Energy Surfaces For Complex Molecules and Molecular Complexes, J. M. Bowman, B. J. Braams, S. Carter, C. Chen, G. Czako, B. Fu, X. Huang, E. Kamarchik, A. R. Sharma, B. C. Shepler, Y. Wang, Z. Xie, J. Phys. Chem. Lett. 1 (2010) 1866-1874.
- Sto08 Intermolecular Potentials, A.J. Stone, Science, 321 (2008) 787-789.
- Chi09 Vibrational and electronic structure of PTCDI and melamine-PTCDI complexes, V. Chiş, G. Mile, R. Ştiufluic, N. Leopold, M. Oltean, Journal of Molecular Structure, 924-926, 47-53 (2009).
- Chi05 Experimental and DFT Study of Pyrazinamide, V. Chiş, A. Pîrnău, T. Jurcă, M. Vasilescu, S. Simon, O. Cozar, L. David; Chemical Physics; 316; 153-163; 2005
- Ben08 Weak intermolecular bonding in N,N'-dimethylethyleneurea dimers and N,N'-dimethylethyleneurea-water systems: The role of the dispersion effects in intermolecular interaction, Bende, L. Almasy, Chem. Phys., 354, 202-210 (2008)
- Ben10 Molecular modeling of phenothiazine derivatives: Self-assembling properties, A. Bende, I. Grosu, I. Turcu, J. Phys. Chem. A, 114, 12479-12489 (2010)
- Beu02 Intermolecular vibrations of large ammonia clusters from helium atom scattering, Beu, T.A., Steinbach, C., Buck, U., J. Chem. Phys., 117, 3149-3159 (2002)

Tema 2 Studiul proprietăţilor atomilor şi moleculelor prin interacţiuni cu câmpul electromagnetic; spectroscopii

Subiectul 2.1. Spectroscopia de înaltă rezoluţie/înaltă sensibilitate

Realizari recente si perspective (la nivel international)

Multifrequency EPR analysis-High Field Effects in EPR Spectroscopy; High Field Effects in EPR Spectroscopy

Rezonanata Electronica Paramagnetica (REP) conventionala a fost in mod traditional folosita in domeniul spectral 9-35 GHz, pentru a obtine informatii structurale despre ionii elementelor de tranzitie, radicali liberi, sau alti centrii paramagnetici. Posibilitatea obtinerii unor campuri magnetice intense (>3T) a permis realizarea spectroscopiei EPR la frecvente ridicate (>95 GHz, HF-EPR).

De ce aceasta tehnica spectroscopica, ca si double-resonance spectroscopy imbunatateste simultan atat rezolutia cat si sensibilitatea: Se stie ca intensitatea unei tranzitii este proportionala cu diferenta de populatie intre cele doua nivele implicate. Prin cresterea frecventei (de circa doua ordine marime) diferenta de populatie creste foarte mult, deci si sensibilitatea. Prin cresterea intensitatii campului magnetic cu doua ordine de marime, creste de regula si distanta dintre liniile din spectrele REP cu acelasi ordin de marime. Deci creste si puterea de rezolutie.

Avantajele folosirii spectroscopiei HF-EPR , precum si exemple selectate au fost trecute in revista in literatura de specialitate. Spectrele HF-EPR in comparatie cu cele obtinute in spectroscopia EPR conventionala prezinta efecte de camp inalt, ce pot avea importante aplicatii in studiul proceselor de relaxare, a delocalizarii proiectie de spin in in

lanțuri de ioni paramagnetici slab legați-conductibilitatea magnetică, etc. Un alt exemplu, EPR la frecvențe multiple este o metodă spectroscopică utilă pentru analiza multipletului fundamental și a simetriei locale în diverse înconjurări a ionilor Kramers de pământuri rare (RE^{3+}) cu o importantă contribuție orbitală. De obicei, desplicarea în câmp cristalin (CFS) a multipletului fundamental pentru ionii pământurilor rare- RE^{3+} este de zeci sau sute de cm^{-1} . Până acum, informații privind CFS erau obținute din studiul spectrelor optice sau de infraroșu (IR), dar într-un mod incomplet. Astfel spectrele optice și IR nu pot să distingă clar simetriile locale asociate cu prezenta impurităților RE^{3+} în matrici solide. Acest lucru poate fi obținut parțial prin folosirea spectroscopiei EPR la frecvențe convenționale. Pentru ionii RE^{3+} la temperaturi scăzute, spectroscopia EPR convențională detectează semnale atribuite dubletului fundamental al multipletului, iar spectrele EPR respective sunt descrise de un spin efectiv semi-intreg. La asemenea frecvențe joase, nici o informație privind valoarea CFS a stării fundamentale nu este posibilă. Totuși, amestecul de dubleti excitați de către interacția Zeeman la dubletul fundamental, face ca valorile diagonale ale tensorului ce caracterizează interacția Zeeman să devină la câmpuri și frecvențe înalte dependente de frecvență. Mai mult, în cazul simetriilor axiale, spectrele HF-EPR ale RE^{3+} prezintă, spre deosebire de spectrele spectroscopiei EPR convenționale o dependență unghiulară azimutală. Acest efect HF face o distincție clară între diversele simetrii axiale posibile.

- Contribuție românească (recentă) și obiective propuse (viitor)

*Institutul National C-D pentru Fizica Materialelor (IFTM)- Magurele
Universitatea București*

The activity can be summarized as follows:

- Investigations at atomic scale by microstructural (TEM/HRTEM, XRD) and spectroscopic (EDS, EPR and optical) methods, of native and induced defects in bulk and nanostructured solid materials; Synthesis of nanostructured materials; Investigations of materials properties by using paramagnetic point defects as atomic probes and of the changes induced by defects in ordered and partially disordered solids [1-6].
- efecte de câmp înalt în spectroscopia paramagnetică de rezonanță [7-12]

Referințe (selectie relevantă)

1. Ghica, D; Nistor, SV; Vrielinck, H; Callens, F; Schoemaker, D, *X- and Q-band ENDOR study of the Fe+(II) center in chlorinated SrCl₂ : Fe crystals. Physical Review B*, **70**, (2004).
2. Janssen, G; Goovaerts, E; Nistor, SV; Bouwen, A; Schoemaker, D; Vogelsang, H; Von der Osten, W, *A 95 GHz ODMR study of AgCl nanocrystals embedded in crystalline KCl matrix. Radiation Effects And Defects In Solids*, **156**, 141-144 (2001).

3. Vrielinck, H; Ghica, D; Callens, F; **Nistor, SV**; Schoemaker, D, *X and Q-band ENDOR study of the Fe+(I) center in chlorinated Srcl(2) single crystals. Radiation Effects And Defects In Solids, 155*, 107-111 (2001).
4. **Nistor, SV**; Stefan, M; Schoemaker, D; Goovaerts, E; Dinca, G, *Multifrequency ESR studies of paramagnetic point defects in cubic boron nitride crystals. Radiation Effects And Defects In Solids, 156*, 191-194 (2001).
5. Goovaerts, E; Nistor, SV; **Ghica, D**; Taniguchi, T, *High frequency ESR of native point defects in beryllium doped c-BN single crystals. Physica Status Solidi A- 201* 2591-2598 (2004).
6. Nistor, SV; Stefan, M; Goovaerts, E; Nikl, M; Bohacek, P, *Electron paramagnetic resonance properties of Gd3+ ions in PbWO4 scintillator crystals. Journal Of Physics-Condensed Matter, 18*, 719-728 (2006).
7. **Florin F. Popescu**, *High Field Effects in EPR Spectroscopy*, www.scitopics.com Materialul a aparat in SciTopics (ELSEVIER) la sectiunea Atomic end Molecular Physics pe 14 aprilie 2010
8. M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, **V. Bercu**, and **F.F. Popescu**, *Relaxation processes in a multilevel spin system investigated by linewidth analysis of the multifrequency EPR spectra*, Phys. Rev. B, 67, 014225, 1-11, (2003)
9. **F.F. Popescu**, M. Martinelli, C.A. Massa , L.A. Pardi , and **V. Bercu**, *Delocalization of spin projection in weak exchange linear chains, evidenced by multi-frequency high-field EPR spectroscopy*,Magnetic Resonance in Chemistry, 43, S215-S220, (2005)
10. **F.F. Popescu**, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, and **V. Bercu**, *Multifrequency Electron Paramagnetic Resonance of Ce³⁺ in Gd(HBPz₃)₂ tropolonate complex: High field effects*,J. Phys: Cond. Matt. 17, 5563-5575, (2005).
11. **F.F. Popescu**, **V. Bercu**, J.N. Barascu, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, M. Stefan, S.V. Nistor, M. Nikl, and P. Bohacek, *Study of the ground multiplet of Kramers rare earth ions in solid matrices by multifrequency electron paramagnetic resonance spectroscopy: Nd³⁺ in PbWO₄ single-crystals*, Journal of Chemical Physics 131 Article Number: 034505 (2009).
12. **F.F. Popescu**, **V. Bercu**, J.N. Barascu, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, M. Stefan, S.V. Nistor, M. Nikl, *Study of the Kramers rare earth ions ground multiplet with a large orbital contribution by multifrequency EPR spectroscopy: Ce³⁺ in PbWO₄ scintillator*, Optical Materials 32 570–575 (2010).

Grupuri importante din străinătate:

Goovaerts, E, Univ Antwerp, Dept Phys, B-2610 Antwerp, Belgium.(articole in colaborare cu SV Nistor)

E.J. Reijerse, *High-Frequency EPR Instrumentation, Applied Magnetic Resonance, 37*, 795-818 (2010)

Dante Gatteschi, Roberta Sessoli, Department of Chemistry, University of Florence, Via Maragliano 75, 0144 Firenze, Italy

D. Gatteschi, L.A. Pardi, *High Frequency EPR Spectroscopy*, Book Series Lecture Notes in Physics, vol. 595, Springer (2002)

PR Reidi and GM Smith School of Physics and Astronomy, University of St. Andrews, St. Andrews, HF-EPR Laboratory

P.R Reidi and G. Smith , *Progress in High Field EPR: Inorganic Materials*, **Electron Pramagnetic Resonance, The Royal Society of Chemistry, 19**, 338-373 (2004)

M Martinelli, Luca Pardi, CA Massa, G Annino HF_EPR Laboratory, Istituto per I processi fisico-chimici , Pisa, Italy (articole in colaborare cu FF Popescu)

- **Referinte (selectie relevanta)**

1. E.J. Reijerse, *High-Frequency EPR Instrumentation*, Applied Magnetic Resonance, 37, 795-818 (2010)

2. D. Gatteschi, L.A. Pardi, *High Frequency EPR Spectroscopy*, Book Series Lecture Notes in Physics, vol. 595, Springer (2002)

3. P.R Reidi and G. Smith , *Progress in High Field EPR: Inorganic Materials*, Electron Pramagnetic Resonance, The Royal Society of Chemistry, 19, 338-373 (2004)

4. *How and Why the Characterization of Magnetic Materials Can Give Directions in the Methodological Development in High Field-High Frequency EPR*. L.C. Brunel, A. Caneschi, A. Dei, D. Friselli, D. Gatteschi, A.K. Hassan, L. Lenci, M. Martinelli, C.A. Massa, L.A. Pardi, F.F. Popescu, I. Ricci, L. Sorace, Res. Chem. Intermediats , 28, 215-249 (2002)

Subiectul 2.2. Metode spectroscopice pentru studiul structurii și proprietăților atomilor și sistemelor moleculare

- **Realizari recente si perspective (la nivel international)**

State of the art

Spectroscopy is basically an experimental subject and is concerned with the absorption, emission or scattering of electromagnetic radiation by atoms or molecules. It covers a very wide area which is being widened further by the introduction of Fourier transformation techniques, the development of lasers, and such techniques as photoelectron spectroscopy or AFM and STM microscopies. Spectroscopy occupies a very special position in chemistry, physics and in science in general, being capable of providing accurate answers to some of the most searching questions, particularly those concerning atomic and molecular structure.

- **Contributie romaneasca(recenta) si obiective propuse(viitor)**

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR)

Activitatea consta in implementare si dezvoltarea de metode spectroscopice pentru:

- Studiul prin CRDS a unor hidrocarburi poliaromatice in jet supersonic
- Studiul prin spectroscopie de absorbtie, fluorescenta, fosforescenta, Raman, FTIR, optoacustica, a unor molecule de interes biomedical
- Studiul spectral privind fotostabilitatea unor medicamente nou sintetizate.

Obiective

- Studii spectroscopice, fluidice si calorimetrice ale micro-nanopicuturilor; aplicatii tehnologice si biomedicale ale acestora
- Studii optico-spectrale ale compusilor de interes bio-medical
- Dezvoltarea de tehnici spectroscopice pentru detectia urmelor de poluanti ai mediului

- **Referinte (selectie relevanta)**

1. “ $S_1(^1A_1) \leftarrow S_0(^1A_1)$ transition of benzo[g,h,i]perylene in supersonic jets and rare gas matrices”, G. Rouillé, M. Arold, **A. Staicu**, S. Krasnokutski, F. Huisken, Th. Henning, X. Tan, F. Salama, J. Chem. Phys. 126, 174311-1/174311-11, 2007. Supplemental material: Absorption bands of perylene and its complexes with 1 and 2 argon atoms in the 24059–26182 cm^{-1} range (010717JCP.epaps)
2. “ $S_1 \leftarrow S_0$ transition of 2,3-benzofluorene at low temperature in the gas phase”, **A. Staicu**, G. Rouille, R. Scholz, D. Pouladsaz Th. Henning, F. Huisken, J. Chem Phys. 129, 074302-1/074302-10, 2008.
3. “In vivo studies of the effects of alkyl substituted benzo[b]pyridinium compounds exposed to optical radiation”, R.A. Pascu, M. Trifu, M. Dumitrescu, A. Mahamoud, **A. Staicu**, B. Carstocea, M.L. Pascu, Rom. Rep. Phys. 60, 899-908, 2008.
4. “Cavity Ring-Down Laser Absorption Spectroscopy of Jet-Cooled L-Tryptophan”, G. Rouillé, M. Arold, **A. Staicu**, Th. Henning, F. Huisken, J. Phys. Chem. A 113, 8187-8194, 2009.
5. Pascu, M. O. Romanitan, J.M. Delgado, L. Danaila, **M.L. Pascu**, “Laser induced fluorescence, measurements on brain tissues”, The Anatomical Record, vol. 292, pg. 2013-2022, (2009)
6. **M.L. Pascu**, **I.R. Andrei**, M. Ferrari, **Angela Staicu**, **Adriana Smarandache**, A. Mahamoud, **V. Nastasa**, L. Liggieri, “Laser beams resonant interaction with micro-droplets which have a controlled content”, Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects, Vol. 365, nr. 1-3, pag. 83-88, (2010)
7. Jacqueline Chevalier, Abdallah Mahamoud, Milad Baitiche, Elissavet Adam, Miguel Viveiros, **Adriana Smarandache**, **Andra Militaru**, **Mihail L. Pascu**, Leonard Amaral, Jean-Marie Pagès, “Quinazoline derivatives are efficient chemosensitizers of antibiotic activity in Enterobacter aerogenes, Klebsiella pneumoniae and Pseudomonas aeruginosa resistant strains”, International Journal of Antimicrobial Agents, Vol. 36, nr. 2, p. 164-168, 2010
8. **A. Smarandache**, M. Trelles, **M. L. Pascu**, “Measurement of the modifications of Polidocanol absorption spectra after exposure to NIR laser radiation”, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials Vol. 12, No. 9, p. 1942 – 1945, 2010

9. **M.L.Pascu**, A.Pascu, **A.Staicu**, **I.R.Andrei**, **V.Nastasa** “Tunable lasers at the Laser Spectroscopy Group: short form history from the beginnings to date”, Romanian Reports in Physics, vol.62, no. 3, 2010
10. **Staicu, A.**, Rouill, G., Henning, Th., Huisken, F., Pouladsaz, D., Scholz, R., *S₁ ← S₀ transition of 2,3-benzofluorene at low temperatures in the gas phase*, Journal of Chemical Physics, 129 (7) 2008,

Universitatea Babeș-Bolyai (UBB) – Cluj

Objectives

1. Determination of the structure of molecules and complex molecular systems
2. Characterization of the interaction of molecules with electromagnetic fields
3. Elucidation of the mechanisms governing the adsorption of molecules on metallic and non-metallic surfaces
4. Gaining fundamental insight into biological processes using spectroscopical methods

Romanian contributions

Vibrational spectroscopy:

S. Aștilean, N. Leopold, S. Cîntă Pînzaru, D. Maniu, Babeș-Bolyai University, Faculty of Physics

I. Bratu, C. Munteanu, INCDTIM Cluj-Napoca

NMR and EPR spectroscopies:

S. Simon, O. Cozar, L. David, G. Damian, Babeș-Bolyai University, Faculty of Physics

M. Bogdan, C. Filip, INCDTIM Cluj-Napoca

I. Ardelean, Technical University, Cluj-Napoca

Mass spectrometry:

M. Culea, Babeș-Bolyai University, Faculty of Physics

Z. Moldovan, INCDTIM Cluj-Napoca

Grupuri din străinătate:

Marina Brustolon, Universita degli Studi di Padova, Italy

Rui Fausto, University of Coimbra, Portugal

Gabor Keresztury, Hungarian Academy of Science, Hungary

Bernhard Lendl

Dietrich Zahn

Bibliografie

1. L. Maniero, **V. Chis**, A. Zoleo, M. Brustolon, A. Mezzetti, Three different tyrosyl radicals identified in L-Tyrosine HCl crystals upon γ -irradiation: magnetic characterization and temporal evolution, J. Phys. Chem. B, 112, 3812-3820, 2008

2. V. Szeghalmi, L. Leopold, S. Pînzaru, **V. Chiş**, I. Silaghi-Dumitrescu, M. Schmitt, J. Popp, W. Kiefer, *Adsorption of 6-mercaptapurine and 6-mercaptapurine-riboside on silver colloid: A pH dependent surface enhanced Raman spectroscopy and density functional theory study. Part II. 6-mercaptapurine-riboside*; Biopolymers; 78; 298-310; 2005
3. Nicolae Leopold, **Simona Cîntă-Pînzaru**, Laszlo Szabo, **Vasile Chiş**, Onuc Cozar, Wolfgang Kiefer, *Raman and SERS study of metoclopramide at different pH values*, Journal of Raman Spectroscopy, 41 (2010) 248-255
4. Fălămaş, A., **Pînzaru, S.C.**, Dehelean, C.A., Peev, C.I., Soica, C., *Betulin and its natural resource as potential anticancer drug candidate seen by FT-Raman and FT-IR spectroscopy*, Journal of Raman Spectroscopy 42 (1), pp. 97-107, 2011
5. **Leopold, N.**, Lendl, B., *On-column silver substrate synthesis and surface-enhanced Raman detection in capillary electrophoresis, 2010*; Analytical and Bioanalytical Chemistry;
6. **Leopold, N.**, Lendl, B., *A new method for fast preparation of highly surface-enhanced raman scattering (SERS) active silver colloids at room temperature by reduction of silver nitrate with hydroxylamine hydrochloride, 2003*; Journal of Physical Chemistry B;
7. **V. Chiş**, A. Pîrnău, M. Vasilescu, R. A. Varga, O. Oniga; *X-ray, 1H NMR and DFT study on 5-para-X-benzylidene-thiazolidine derivatives with X=Br,F*; J. Mol. Struct. (Theochem) 831, 63-74 (2008)
8. **O. Cozar**, N. Leopold, C. Jelic, **V. Chiş**, L. David, A. Mocanu, M.Tomoaia-Cotisel; *IR, Raman and surface-enhanced Raman study of desferrioxamine B and its Fe(III) complex, ferrioxamine B*; Journal of Molecular Structure; 788(1-3); 1-6; 2006
9. Sharma, A., Reva, I., Fausto, R., *Conformational switching induced by near-infrared laser irradiation*, Journal of the American Chemical Society 131 (25), pp. 8752-8753, 2009
10. Lucena Jr., J.R., Sharma, A., Reva, I.D., Araújo, R.M.C.U., Ventura, E., Do Monte, S.A., Braga, C.F., (...), Fausto, R., *Matrix isolation FTIR spectroscopic and theoretical study of 3,3-dichloro-1,1,1-trifluoropropane(HCFC-243)*, Journal of Physical Chemistry A 112 (46), pp. 11641-11648, 2008
11. Zahn, D.R.T., Gavrilă, G.N., Gorgoi, M., *The transport gap of organic semiconductors studied using the combination of direct and inverse photoemission*, Chemical Physics 325 (1), pp. 99-112, 2006
12. Dzhagan, V., Valakh, M.Y., Kolny-Olesiak, J., Lokteva, I., Zahn, D.R.T., *Resonant Raman study of phonons in high-quality colloidal CdTe nanoparticles*, Applied Physics Letters 94 (24), art. no. 243101, 2009
13. Li, W., Fronk, M., Kupfer, H., Schulze, S., Hietschold, M., Zahn, D.R.T., Salvan, G., *Aging of rubrene layers in Ni/rubrene heterostructures studied by magneto-optical kerr effect spectroscopy*, Journal of the American Chemical Society 132 (16), pp. 5687-5692, 2010
14. *Indium on a copper phthalocyanine thin film: Not a reactive system*, Ivanco, J., Toader, T., Firsov, A., Brzhezinskaya, M., Sperling, M., Braun, W., Zahn, D.R.T., Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics 81 (11), art. no. 115325, 2010.

Tema 3. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpul laser

Subiectul 3.1. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpuri intense

- **Realizari recente si perspective (la nivel international)**
 - a) *O noua legatura intre ecuatiile cuantice si clasice cu aplicatii la modelarea starilor stationare si a interactiilor intre campuri electromagnetice ultraintense si atomi*
 - b) *Modelare a fenomenului de generare a radiatiilor x foarte energetice prin imprastiere Thomson relativista a fasciculelor laser foarte intense*
 - c) *Materie ‘Ultrarece’ (“Ultracold” matter)*
 - d) *Generarea de pulsuri de attosecunde*
 - e) *Stabilizarea atomilor*

Studiul relatiilor intre ecuatiile cuantice si cele clasice este un domeniu important de cercetare in acest moment, lucru dovedit de bibliografia ultimilor ani. Scopul acestor cercetari este de a simplifica modelarea sistemelor cuantice conservative si neconservative, cum sunt cele reprezentate de starile stationare in atomi si molecule sau de interactiile intre campuri electromagnetice si atomi. Rezolvarea ecuatiilor cuantice necesita solutia unor ecuatii cu derivate partiale, pe spatii multidimensionale, a caror dificultate este cunoscuta. Simplificarea acestor solutii este posibila, prin gasirea unor proprietati noi ale sistemelor in discutie, proprietati legate de relatiile care exista intre ecuatiile cuantice si cele clasice, scrise pentru acelasi sistem. Simplificarea este datorata faptului ca aceste proprietati conduc la o metoda de calcul care evita calculul direct al functiilor de unda.

Generarea radiatiilor foarte energetice, cu perioade de oscilatie in domeniul atosecundelor, este una dintre problemele cele mai importante in noul domeniu al interactiilor intre fascicule laser foarte energetice si electroni sau atomi. O metoda eficienta de generare a acestor radiatii este prin imprastiere Thomson relativista. Acesta este unul dintre subiectele cele mai fierbinti in cercetare la nivel international.

Materia ultrarece (*Nature* 416, no. 6877(2002)) s-a dezvoltat ca directie de cercetare in cadrul fizicii cuantice a ultimilor ani. In acest sens se are in vedere controlul cuantic al interactiilor dintre atomii reci folosind pulsuri ultracurte si tehnici de modificare a formei pulsului laser. Fotoasocierea atomilor reci ca tehnica de formare a moleculelor reci (*Eur. Phys. J. D* 31, 149 (2004), *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, 19 (2006)) reprezinta un exemplu in acest sens. Experimentele de fotoasociere rece au fost dezvoltate in principal folosind laseri in domeniul continuu (*Rev. Mod. Phys* **78**, 483(2006)) deoarece acestia permit posibilitatea de selectie a tranzitiilor dar, recent, s-au raportat si experimente ce folosesc laseri in femtosecunde (*Phys. Rev. Lett.* **96**, 173002 (2006), *Phys. Rev. A* **73**, 023414 (2006)). Aceste experimente demonstreaza coerenta procesului dar, totodata, scot in evidenta si dificultatea de a creste numarul de molecule formate.

Studiile teoretice asupra fotoasocierii pulsate exploreaza o multitudine de scheme pentru controlul dinamicii moleculare reci: cu pulsuri de tip “chirped” (chirped pulses) (*Phys. Rev. A*, 63, 013412 (2000), *Eur. Phys. J. D.*, 31, 239, (2004)), cu scheme de tipul “pump-dump” pentru stabilizarea moleculelor reci (*Phys. Rev. A* 76, 053408 (2007)), cu pasaj adiabatic (*Phys. Rev. A*, 75, 013405 (2007)).

Stabilizarea atomilor in camp laser ultra intens reprezinta unul din principalele rezultate ale teoriei interactiunii laser-atom. Fenomenul, studiat intr-un potential Kramers-Henneberger are o interpretare clasica. Simularea numerica bazata pe metoda medierii in spatiul fazelor pentru un potential unidimensional este in concordanta cu teoria cuantica.

- **Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)**

Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) – Magurele

Institutul de Stiinte Spatiale (ISS) – Magurele

Institutul National pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare, Cluj

Universitatea Bucuresti

In articole listate in Ref.[1] s-a prezentat un model ondulatoriu pentru sisteme conservative. S-a dedus o metoda semiclassicala de calcul al valorilor proprii energetice ale acestor sisteme, care este bazata pe o legatura directa intre ecuatiile cuantice si cele clasice. Precizia metodei noastre este comparabila cu precizia metodei Hartree-Fock aplicata acelorasi sisteme. Deasemenea, s-a demonstrat ca metode similare se aplica in cazul sistemelor neconservative compuse din electroni si camp electromagnetic foarte intens. Rezultatele teoretice pe care le-am obtinut conduc la justificarea metodelor clasice in noile domenii legate de generarea radiatiilor X foarte energetice, cu perioade de oscilatie in domeniul atosecundelor, prin interactia intre fascicule foarte intense si atomi sau prin imprastiere Thomson relativista. Astfel de metode, care evita calculul direct al functiei de unda, pot deveni importante in viitor.

Contributia romaneasca s-a aliniat eforturilor recente de a controla interactiunile interatomice intr-un gaz atomic rece folosind pulsuri laser cu forma modificata, scopul fiind de a directiona evolutia sistemului catre o stare dorita. S-a investigat astfel [2] teoretic, modalitatea de control al dinamicii fotoasocierii dintre doi atomi reci pentru a forma molecule in stari vibrationale selectate, considerandu-se pulsuri de laser intens. Studiul a constatat din simularea numerica a dinamicii, atat pe durata procesului de fotoasociere cat si dupa puls.

Grupurile de cercetare din tara au raporat rezultate deosebite, Ref. [3], asupra propagării pulsurilor laser ultrascurte și ultraintense în medii gazoase ionizante; generării de armonice superioare și de pulsuri de attosecunde, difuziei în sisteme multistrat cu aplicații în siguranța alimentară; S-au efectuat calcule ab-initio de chimie cuantică, teoria funcționalei de densitate; Au fost studiate interacții intermoleculare, structuri geometrice, constante de forta, vibrații moleculare armonice și anarmonice; Modificări structurale ADN puse în evidența prin spectroscopie vibrațională; Dinamica moleculară; Arhitecturi supramoleculare cu aplicații în nanotehnologie; Tranziții structurale și dinamica în ADN.

Contributia romana in modelarea fenomenului de stabilizare a atomilor in camp intens laser este deosebita[4] si are in vedere observabilitatea dinamicii de stabilizare, spre ex., a starii fundamentale a hidrogenului in camp intens laser circular polarizat.

- **Referinte (selectie relevanta)**

- [1]. **A. Popa**, Journal of Physics A: Mathematical and General, Vol. 36, p. 7569, 2003; Journal of Chemical Physics, Vol. 122, p. 244701, 2005; European Physical Journal D, Vol. 49, p. 279, 2008; European Physical Journal D, Vol. 54, p. 575, 2009; Molecular Physics, Vol. 109, p. 575, 2011; IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 40, p. 1519, 2004; IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 43, p. 1183, 2007; Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 15, p. L559, 2003; Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics, Vol. 41, p. 015601, 2008; Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics, Vol. 42, p. 025601, 2009.
- [2] **Vatasescu, M**, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 42 (16), p. 2009.
- [3] **Tosa, V**; Kim, KT; Nam, CH, PHYSICAL REVIEW A, 79 (4), p. , 2009; Tosa, V; Balogh, E; Kovacs, K, PHYSICAL REVIEW A, 80 (4), 2009; Altucci, C; Tosa, V; Velotta, R, PHYSICAL REVIEW A, 75 (6), p. , 2007.
- [4] **Stroe, M; Simbotin, I; Gavrilă, M**, PHYSICAL REVIEW A, 78 (3), 2008;.Gavrilă, M; Simbotin, I; Stroe, M, PHYSICAL REVIEW A, 78 (3),2008;Dondera, M; Muller, HG; Gavrilă, M, PHYSICAL REVIEW A, 65 (3), 2002. Boca, M; Muller, HG; Gavrilă, M, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 37 (1), pp. 147-163, 2004.

Subiectul 3. 2. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpul laser

- **Realizari recente si perspective (la nivel international)**

Dezvoltarea tehnicilor laser, a surselor laser de intensitate inalta, a facut deasemenea posibila explorarea proceselor multifotonice atunci cand un numar mare de fotoni este necesar pentru a excita sau ioniza un atom (P. Lambropoulos and P. Zoller, Phys. Rev. A **24**, 379 (1981)). Campul laser intens implica nu numai ca tranzitiile cu un foton contribuie la ionizare ci si tranzitiile multifotonice. Progrese importante au fost facute in studiul ionizarii multifotonice a atomilor cu unul sau doi electroni de valenta, precum si in studiul efectelor de polarizare (P. Lambropoulos, P. Maragakis, and Jian Zhang, Phys. Rep. **305**, 203 (1998)). Determinarea cu acuratete a spectrului energetic a fotoelectronului in ionizarea dincolo de prag (ATI) este o problema inca deschisa, mai ales in prezenta pulsurilor laser de intensitate inalta cand pot fi observate mai mult de douazeci de picuri in spectrul ATI.

Fenomenul de stari degenerate induse laser (LIDS- Laser Induced Degenerate States) este folosit pentru studierea transferului de populatie intre stările de autoionizare. Frecventa si intensitatea campului laser pot fi ajustate astfel incat energia si largimea

starii fundamentale imbracate sa coincida cu energia si largimea starii de autoionizare imbracate.

La interactia sistemelor atomice cu pulsuri de laser intens, se manifesta si generarea de armonici de ordin inalt (*high order harmonics generation -HHG*). Pentru un sistem atomic dat, depinzand de intensitatea si de frecventa laserului, se poate produce radiatie coerenta cu frecventa in domeniile *EUV* si soft *X*. In vederea unei descrieri teoretice complete a acestei conversii de energie, au fost propuse de-a lungul anilor diverse modele si aproximatii. Spre exemplu, modelul hibrid (classic si cuantic) in trei pasi (*three step model-TSM*) descrie procesul ca o consecinta a ionizarii unui atom aflat in vecinatatea maximului campului laser, urmata de miscarea clasica a electronului in acelasi camp si de recombinarea sa cu ionul parinte. A fost, de asemenea, dezvoltat si un model cuantic complet in trei pasi pentru ionul negativ de hidrogen. Calculele *ab initio* pentru caracterizarea raspunsului atomilor cu multi electroni la un camp laser intens si, implicit studiul precis al armonicilor de ordin inalt generate de acesti atomi se afla dincolo de capacitatile sistemelor actuale de calcul.

Imprastierea radiatiei electromagnetice pe atomi izolati, plasmе sau tinte solide reprezinta un instrument important in investigarea proprietatilor materiei. Procesele asistate laser cum ar fi imprastierea electronilor pe atom, efectul Auger sau imprastierea Compton neliniara prezinta interes din punct de vedere teoretic si experimental. Imprastierea Compton asistata laser presupune imprastierea unui foton pe un electron liber sau legat in prezenta unui camp laser. Timp de multi ani, teoria matematica a proceselor atomice/moleculare asistate/induse laser neperturbativ a fost oarecum limitata. In cazul problemelor complexe au fost obtinute doar cateva rezultate exacte. Acestea se bazeaza pe teoria Floquet si pe dilatara complexa. Recent, s-a dovedit ca sumabilitatea Borel si transseriile rerezinta noi metode pentru studiul proceselor atomice in camp laser puternic sau in camp de microunde. Rezultatele sunt incurajatoare deoarece, fiind diferite de teoria perturbativa standard aplicabila doar pentru campuri mici, acestea raman calitativ in concordanta cu rezultatele experimentale chiar si in cazul campurilor puternice.

- **Contributia romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)**

-

Institutul de Stiinte Spatiale (ISS) -Magurele

Universitatea Bucuresti (UB)

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare (ITIM)- Cluj

Institutul National pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR)-Magurele

Universitatea Babes-Bolyai –Cluj

- a) ***Studiul neperturbativ al atomilor cu doi electroni de valenta, atomi aflati in interactiune cu pulsuri ultracurte de laser polarizat liniar sau circular.***
- b) ***Studiul imprastierii asistate laser al radiatiei pe electroni liberi si legati***
- c) ***Studiul generarii armonicilor de ordin inalt folosind sisteme atomice cu unul sau doi electroni.***
- d) ***Dinamica de fotodisociere a moleculelor in camp intens laser***

e) *Procese atomice induse laser*

S-a studiat din punct de vedere teoretic ionizarea multifotonica a atomilor cu doi electroni de valenta aflati in interactie cu pulsuri scurte de laser polarizat liniar, respectiv circular. S-a considerat ca intensitatea laserului este moderata sau inalta si s-a luat pentru investigare atomul de Ca. Pentru a studia interactiunea sistemului atomic cu doi electroni de valenta cu un puls laser s-a folosit o metoda neperturbativa pentru a rezolva ecuatia Schrodinger dependenta de timp: functia de unda dependenta de timp este dezvoltata in serie ca o superpozitie liniara de doua functii proprii corespunzatoare celor doi electroni si discretizata conform unei baze atomice discrete. Metoda folosita pentru determinarea bazei atomice discrete s-a bazat pe dezvoltarea in serie a functiilor de unda radiale intr-un set de functii *B-spline*. [1]

In studiul imprastierii asistate laser al radiatiei pe electroni liberi si legati s-a urmarit sa exploreze cantitativ un proces de ordinul doi in prezenta unui camp electromagnetic extern. Cazul electronului liber a fost tratat cu formalismul teroretic corespunzator efectului Compton neliniar [2].

Studiu generarii de armonice de ordin inalt s-a axat pe dependenta proprietatilor radiatiei emise de pulsul laser si de alegerea starii initiale. S-a studiat spectrul radiatiei emise de catre un ion de secventa izoelectronica cu hidrogenul, ion expus la un puls laser intens, in functie de: a) intensitatea, frecventa, durata si forma pulsului; b) faza (fazele) relativa a starilor din superpozitia coerenta care descrie atomul la inceputul partii de amplitudine constanta a pulsului; c) numarul atomic.

Pentru cazul atomului cu multi electroni, s-au examinat formulele ce descriu fenomenul de generare de armonici. Acest formalism s-a aplicat celui mai simplu atom cu doi electroni, atomul de heliu, neglijand intai interactiunea dintre electroni, dar incluzand efectul identitatii particulelor. A fost tratata de maniera aproximativa repulsia coulombiana intre electroni. Aceasta procedura ajuta la intelegerea calitativa a relatiei de scalare cu numarul atomic pentru HHG si poate fi imbunatatita prin ajustarea potentialului folosit in aproximatia de ordinul zero.[3]

Un numar important de procese atomice (asistate sau induse laser) si moleculare au fost studiate de echipele de cercetare din Romania. Aceste studii au fost publicate intr-un numar impresionant de lucrari stiintifice si fac subiectul multor colaborari internationale [4]. Grupul de la UBB a dezvoltat o metoda numerica bazata pe rezolvarea ecuatiei Schrodinger dependente de timp pentru ionizarea atomilor si a moleculelor prin pulsuri laser intense si ultracurte. S-a dezvoltat si o metoda iterativa in spatiul impulsurilor, care s-a aplicat pentru ionizarea atomului de hidrogen , a disocierii pozitroniului , si a ionizarii moleculei de apa . S-a aplicat si o alta metoda, neiterativa, pentru studiul excitarii si ionizarii [5].

Referinte (selectie relevanta)

1. Nakajima, T; **Buica, G**, PHYSICAL REVIEW A, 74 (2), 2006; Nakajima, T; **Buica, G**, PHYSICAL REVIEW A, 71 (1), 2005; **Buica, G**; Nakajima, T, PHYSICAL REVIEW A, 81 (4), 2010; Nakajima, T; **Buica, G**, PHYSICAL REVIEW A, 71 (1), 2005. **Buica, G**; Nakajima, T, PHYSICAL REVIEW A, 81, 2010; **Buica, G**; Nakajima,

- T, PHYSICAL REVIEW A, 79 (1), 2009;Nikolopoulos, LAA; **Buica-Zloh, G**; Lambropoulos, P, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 26 (3), pp. 245-251, 2003, **A. Cionga**, F. Ehlötzky, and **G. Zloh**, Phys. Rev. A **64**, 043401-1- 043401-10 (2001);
2. **Boca, M; Florescu, V**, PHYSICAL REVIEW A, 80 (5), 2009;Parker, JS; Armstrong, GSJ; **Boca, M**; Taylor, KT, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 42 (13),2009;Pratt, RH; LaJohn, LA; **Florescu, V**; Suric, T; Chatterjee, BK; Roy, SC, RADIATION PHYSICS AND CHEMISTRY, 79 (2), pp. 124-131, 2010;**Costescu, A; Spanulescu, S**, PHYSICAL REVIEW A, 73 (2), 2006. **Fifirig, M; Cionga, A**,JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 35 (4), pp. 821-828, 2002. **Budriga, O; Dondera, M; Florescu, V**, NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS, 261 (1-2), pp. 180-183, 2007.
 3. **Chirila, C; Boca, M; Dinu, V; Florescu, V**, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 27 (1), pp. 15-22, 2003;**Fifirig, M; Cionga, A**; Ehlötzky, F, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 23 (3), pp. 333-336, 2003;**Boca, M; Florescu, V**, PHYSICAL REVIEW A, 80 (5), 2009;
 4. Pettazzi, F; Alonzo, M; Centini, M; **Petris, A; Vlad, VI**; Chauvet, M; Fazio, E, PHYSICAL REVIEW A, 76 (6), p. , 2007; Luc-Koenig, E; Kosloff, R; Masnou-Seeuws, F; **Vatasescu**, PHYSICAL REVIEW A, 70 (3), 2004; **Florescu, A**; Obolensky, OI; Pratt, RH, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 35 (13), pp. 2911-2925, 2002;Brouard, M; **Cireasa, R**; Clark, AP; Quadrini, F; Vallance, C, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 8 (47), pp. 5549-5563, 2006. **Cionga, A; Fifiring, M**; Ehlötzky, F, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 35 (23), pp. 4875-4884, 2002; Brouard, M; **Cireasa, R**; Clark, AP; Groenenboom, GC; Hancock, G; Horrocks, SJ; Quadrini, F; Ritchie, GAD; Vallance, C, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 125 (13),2006. Bass, MJ; Brouard, M; **Cireasa, R**; Clark, AP; Vallance, C, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 123 (9), 2005; **Stancalie, V**,. NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS, 267 (2), pp. 305-309,2009;**Stancalie V, Pais V, Mihailescu A, Budriga O, Oprea A**, ROMANIAN REPORTS IN PHYSICS 62 (2010), pp. 528-545;**Stancalie V**, 2005, PHYSICS OF PLASMAS 12, 043301 (2005);**Stancalie V**,2005, PHYSICS OF PLASMAS 12, 100705
 5. Altucci, C; Velotta, R; Heesel, E; Springate, E; Marangos, JP; Vozzi, C; Benedetti, E; Calegari, F; Sansone, G; Stagira, S; Nisoli, M; **Tosa, V**, PHYSICAL REVIEW A, 73 (4), 2006; **Tosa, V**; Kim, HT; Kim, IJ; Nam, CH, PHYSICAL REVIEW A, 71 (6), 2005, Kim, HT; Kim, IJ; Lee, DG; Hong, KH; Lee, YS; **Tosa, V**; Nam, CH. PHYSICAL REVIEW A, 69 2004; Altucci, C; **Tosa, V**; Velotta, R; Nam, CH, PHYSICAL REVIEW A, 70 (6), 2004; Altucci, C; Bruzzese, R; de Lisio, C; Nisoli, M; Priori, E; Stagira, S; Pascolini, M; Poletto, L; Villoresi, P; **Tosa, V**; Midorikawa, K, PHYSICAL REVIEW A, 68 (3), p. 2003;Kim, HT; **Tosa, V**; Nam, CH, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 39 (13), pp. S265-S274, 2006.;Koppel, H; Doscher, M; Baldea, I; Meyer, HD; Szalay,

PG, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 117 (6), pp. 2657-2671, 2002; **L. Nagy** and S. Borbély, Radiation Physics and Chemistry 76 (2007) 516-520; Borbely Sandor, **Nagy Ladislau**, Phys. Rev. A 77 (2008) 33412-33423; S. Borbély, K Tökési and **L. Nagy**, Nucl. Instr. Meth. B 267 (2009) 292-294; S. Borbély, **L. Nagy**, K. Tökési, Eur. J. Phys. D 59 (2010) 337; Borbely, S; Kiss, GZ; **Nagy, L**, CENTRAL EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS 8 (2010) 249-257

Grupuri importante din străinătate: Referinte

J. Burgdorfer (Tech. Univ. Vienna, Austria):. Arbo, DG; Ishikawa, KL; Schiessl, K, et al. PHYSICAL REVIEW A Volume: 82 Issue: 4 Article Number: 043426 Published: 2010; Kurka, M; Feist, J; Horner, DA, et al.

Source: NEW JOURNAL OF PHYSICS Volume: 12 Article Number: 073035 Published: 2010; Arbo, DG; Ishikawa, KL; Schiessl, K, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 81 Issue: 2 Article Number: 021403 Published: 2010; Yoshida, S; Dimitriou, KI; Burgdorfer, J, et al. Conference Information: 14th International Conference on Physics of Highly Charged Ions, Date: SEP 01-05, 2008 Univ Electro Commun Chofu JAPAN Source: 14TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON THE PHYSICS OF HIGHLY CHARGED IONS (HCI 2008) Volume: 163 Pages: 12009-12009 Published: 2009; Ishikawa, KL; Schiessl, K; Persson, E, et al. Conference Information: 16th International Conference on Ultrafast Phenomena, Date: JUN 09-13, 2008 European Phys Soc Stresa ITALY, ULTRAFAST PHENOMENA XVI Volume: 92 Pages: 30-32 Published: 2009; Feist, J; Pazourek, R; Nagele, S, et al. Conference Information: 26th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, Date: JUL 22-28, 2009 Western Michigan Univ Kalamazoo MI

Source: XXVI INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHOTONIC, ELECTRONIC AND ATOMIC COLLISIONS Volume: 194 Article Number: 012010 Published: 2009 ; Persson, E; Burgdorfer, J; Grafe, Source: NEW JOURNAL OF PHYSICS Volume: 11 Article Number: 105035 Published: 2009; Feist, J; Pazourek, R; Nagele, S, et al. Conference Information: International Conference on Multi-Photon Processes, Date: 2008 Max Planck Inst Nucl Phys Heidelberg GERMANY Source: JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 42 Issue: 13 Article Number: 134014 Published: 2009; Ishikawa, KL; Schiessl, K; Persson, E, et al. PHYSICAL REVIEW A Volume: 79 Issue: 3 Article Number: 033411 Published: 2009; Arbo, DG; Persson, E; Dimitriou, KI, et al. NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS Volume: 267 Issue: 2 Pages: 330-333 Published: 2009.

F. Martin (Univ. Autonoma Madrid, Spain)

Sanz-Vicario JL, Perez-Torres JF, Morales F, et al. Conference Information: 35th Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL/CHITEL), SEP 18-22, 2009 San Andres Isl, COLOMBIA Source: INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY Volume: 110 Issue: 13 Pages: 2462-2471 Published: NOV 5 2010; Sanz-Vicario JL, Perez-Torres JF, Morales F, et al. Conference Information: 26th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, JUL 22-28, 2009 Western Michigan Univ, Kalamazoo, MI Source: XXVI INTERNATIONAL

CONFERENCE ON PHOTONIC, ELECTRONIC AND ATOMIC COLLISIONS Book Series: Journal of Physics Conference Series Volume: 194 Pages: - Published: 2009; Hacquard S, Delaruelle C, Legue V, et al. Source: MOLECULAR PLANT-MICROBE INTERACTIONS Volume: 23 Issue: 10 Pages: 1275-1286 Published: OCT 2010; Sansone G, Kelkensberg F, Perez-Torres JF, et al. Source: NATURE Volume: 465 Issue: 7299 Pages: 763-U3 Published: JUN 10 2010 Times Cited: 11; Jiang YH, Rudenko A, Perez-Torres JF, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 81 Issue: 5 Article Number: 051402 Published: MAY 2010 Times Cited: 3; Jiang YH, Rudenko A, Plesiat E, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 81 Issue: 2 Article Number: 021401 Published: FEB 2010 Times Cited: 7

P.G. Burke (The Queen's University of Belfast)

BURKE, P.G., FRANCKEN, P., JOICHAIN, C.J. (1991): J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24, 761-790. Times Cited: 141; LATINNE, O., KLISTRA, N.J., DÖRR, M., PURVIS, J., TERAQ-DUNSHEATH, M., JOICHAIN, C.J., BURKE, P.G., NOBLE, C.J. (1995). Phys. Rev. Lett. 74, 46-49, Times Cited: 40

Prof. R.H. Pratt University of Pittsburgh (SUA)

Prof. H. Bachau, Universite de Bordeaux

Prof. A. Maquet, Universite Paris VI

Subiectul 3.3. Control cuantic cu pulsuri laser, dinamica undelor de materie, informație cuantică

- Realizari recente si perspective la nivel international

In ultimii ani studiul proceselor multifotonice in campuri laser bicromatice a devenit un subiect de un interes particular, fiind stimulat de progresele realizate in tehnicile de generare a armonicilor superioare (F. Ehkotky Phys. Rep, **345** (4) 175 (2001)). Acestea au fost folosite recent pentru a pune la dispozitie surse intense de radiatie multicromatica coerenta ce permit studierea unor noi tipuri de procese fizice.

Domeniile fizicii gazelor atomice ultrareci, controlului cuantic al proceselor atomice si moleculare cu pulsuri laser si informatiei cuantice sunt considerate printre cele care aduc problematicile noi cele mai importante si relevante ale urmatorilor ani in fizica atomilor, moleculelor si fotonilor [1].

Fizica gazelor atomice reci a dus la crearea de gaze cuantice reci –sisteme puternic corelate precum condensatele Bose si gazele Fermi reci. A fost deschisa astfel “era cercetarii undelor de materie coerente” [2] : “atom lasers”, optica atomica neliniara, interferometrie si fizica in latici optice, procesarea informatiei cuantice, teste fundamentale ale principiilor mecanicii cuantice, etc. Natura cuantica a interactiunilor atomice la temperaturi foarte joase aduce posibilitatea de a influenta ciocnirile ultra-reci cu campuri externe, pentru a produce o dinamica coerenta si chiar pentru a proiecta noi obiecte cuantice, precum cele care au fost numite “designer molecules” si “designer condensates” [5].

Cercetarile asupra posibilitatilor de implementare a *calcului cuantic* (quantum computation) presupun *procesarea informatiei cuantice* prin sisteme puternic corelate precum gazele cuantice reci [1]. *Memoriile qubit* vor fi tipic formate din atomi si molecule, legaturile dintre qubiti fiind stabilite prin interactiuni electromagnetice intre *memorii atomice sau moleculare* [1,6]. In general, propunerile de computere cuantice atomice sau moleculare necesita capacitatea de a controla gradele de libertate ale atomilor si de a manipula de maniera coerenta atomii si fotonii, sau de a controla coerenta dinamicii moleculare folosind pulsuri laser.

Controlul cuantic pe scale temporale relevante pentru fizica atomica si moleculara a devenit posibil prin dezvoltarea tehnicilor de generare de *pulsuri laser* ale caror forme, intensitati si frecvente pot fi modelate in functie de necesitatile experimentale [3,4]. Pulsuri laser subpicosecunda pot captura imagini ale miscarii vibrationale dintr-o molecula. Pulsuri femtosecunda si attosecunda pot fi generate pentru controlul cuantic al sistemelor atomice si moleculare si pentru manipularea dinamicii pachetelor de unde cuantice. Aplicatiile vizate sunt multiple: controlul optic al fazei si amplitudinii unei functii de unda, crearea unor stari interne cu un timp de viata suficient de lung pentru a putea fi folosite pentru inregistrarea informatiei cuantice, manipularea ciocnirilor atomice si moleculare, studii ale decoerentei, etc.

[1] *Controlling the Quantum World: The Science of Atoms, Molecules, and Photons*, Committee on AMO 2010, The National Academies Press, Washington, D.C., ISBN 978-0-309-10270-4 (2007)

[2] K. Bongs and K. Sengstock, *Physics with coherent matter waves*, Rep. Prog. Phys. 67 907–963 (2004)

[3] M. Shapiro, P. Brumer, *Principles of the Quantum Control of Molecular Processes*, Wiley-Interscience, New Jersey, ISBN 0-471-24184-9 (2003)

[4] S.A. Rice, M. Zhao, *Optical Control of Molecular Dynamics*, Wiley-Interscience, Wiley & Sons, USA, ISBN 0-471-35423-6 (2000)

[5] S. Chu, *Cold atoms and quantum control*, Nature 416, 206-210 (2002); K. Burnett, P.S. Julienne, P.D. Lett, E. Tiesinga, and C.J. Williams, *Quantum encounters of the cold kind*, Nature, 416, 225 (2002).

[6] C. Simon et al., *Quantum memories*, Eur. Phys. J. D **58**, 1-22 (2010)

Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)

Universitatea Bucuresti (UB)

Institutul de Stiinte Spatiale (ISS) – Magurele

Controlul coerent in imprastierea electron-H asistata laser: S-a analizat controlul coerent al fazei in ciocnirile electron-atom de H asistate laser, studiindu-se efectul diferentei de faza relative dintre componentele unui camp electromagnetic bicromatic de frecvente ω si 2ω . [1]

Controlul coerent in studiul starilor autoionizante a atomului de MgA fost studiat controlul coerent al starilor autoionizante in procesul de ionizare a atomului de Mg. A fost investigata influenta starilor rezonante $3s3p$ si $3s4p$ asupra procesului de ionizare in vecinatatea starii autoionizante $3p^2$ a atomului de magneziu aflat in camp laser de intensitati moderate. Folosind un model atomic realist a fost dedusa probabilitatea de

ionizare in camp electromagnetic bicromatic si dezvoltat un cod numeric pentru calculul semnalului de ionizare in cazul pulsurilor laser cu dependenta temporala . [2]

Control cuantic cu pulsuri laser Analize teoretice si calcule numerice: controlul dinamicii moleculare in fotoasocierea atomilor reci si formarea de molecule reci cu pulsuri laser intense si pulsuri laser modulate in frecventa, simularea si analiza dinamicii vibrationale folosind pachete de unde, crearea de stari vibrationale –tinta in sisteme moleculare specifice, simulari numerice pe grile spatiale ale evolutiei temporale in formarea de molecule reci cu pulsuri laser[3]

Trasparenta indusa electromagnetic. Studiul interferentei cuantice intre doua cai de decay radiativ implicand stari inalt excitate ale atomului de hidrogen si posibilitatea utilizarii acestui efect in obtinerea de radiatie coerenta [4]

Obiective propuse (viitor)

– controlul efectului tunel intr-o groapa dubla de potential molecular cu pulsuri laser modulate in frecventa; crearea de pachete vibrationale izolate in Cs₂ .

- **Referinte (selectie relevanta)**

[1] .**Ghiu, I**; Bjork, G; Marian, P; **Marian, TA**, PHYSICAL REVIEW A, 82 (2),2010; **Boca, M**; **Ghiu, I**; Marian, P; **Marian, TA**,. PHYSICAL REVIEW A, 79 (1), 2009; **Ghiu, I**, PHYSICAL REVIEW A, 67 (1), 2003; .Marian, P; **Marian, TA**. PHYSICAL REVIEW A, 77 (6), 2008; Marian, P; Marian, TA, PHYSICAL REVIEW A, 76 (5),2007; .Marian, P; **Marian, TA**, PHYSICAL REVIEW A, 74 (4), 2006; **Ghiu, I**; Karlsson, A, PHYSICAL REVIEW A, 72 (3), 2005; .Marian, P; **Marian, TA**; Scutaru, H, PHYSICAL REVIEW A, 69 (2), 2004.

[2] **Vatasescu. M**, *Atomes froids dans une molécule: photoassociation et effet tunnel*, Éditions universitaires européennes, Südwestdeutscher Verlag für Hochschulschriften, Sarrebruck, Germania, ISBN 978-613-1-55219-9 (2010); Vatasescu, M, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS, 42, 165303, 2009; **M. Vatasescu**, C. Dion, and O. Dulieu, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39, S945-S956 (2006); Luc-Koenig, E; **Vatasescu, M**; Masnou-Seeuws, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 31 (2), pp. 239-262, 2004; Luc-Koenig, E; Kosloff, R; Masnou-Seeuws, F; **Vatasescu, M**, PHYSICAL REVIEW A 70, 033414 2004; **Buica-Zloh, G**; Nikolopoulos, LAA, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 29 (2), pp. 201-208, 2004.

[3] **Vatasescu, M**; Masnou-Seeuws, F, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 21 (2), pp. 191-204, 2002; **Vatasescu M**, ,Dulieu O, Kosloff R, Masnou-Seeuws, PHYSICAL REVIEW A 63, 033407, 2007; . **Buica-Zloh, G**; Nikolopoulos, LAA, EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL D, 29 (2), pp. 201-208, 2004; . **Cionga A.**, Ehlitzky F., and **Zloh G.** , Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 34 (10), 2057-2069 (2001); **Cionga A. and Zloh G.** , Laser Physics, 9 (1), 69-80 (1999).

[4]. **V.V. Grecu and F.F.Popescu**, Rev. Roum. Phys. 33, 4-6, 625-629 (1988); F. F. **Popescu**, Fizika A, 3, 1-6, (1994); **F.F. Popescu**, Phys.Rev.B, 48, 13569-13572 (1993); F.F. Popescu and F. Marica, Rom. Rep. Phys. 4-6, 901-943, (1994); **F.F. Popescu, V.V. Grecu and F. Marica**, Rom. J. Phys. 43, no 1-2, 161-168 (1998); **F.F. Popescu**, Phys. Rev. B, 51, 18007-18010 (1995); **F.F. Popescu**, F. Marica, Rom.Rep.Phys 5-6, 379-387, (1996);, **F.F. Popescu**, invited lecture la 6-th Conference on Optics ROMOPTO'2000,

Bucharest, sept. 2000, Proceedings of SPIE , vol. 4430, 20-26 (2001); **F.F. Popescu**, F. Marica, and G. Radu, Proceedings of SPIE , vol. 3405, 548-555, (1998), invited lecture at the Fifth Conference on Optics ROMOPTO'97 Bucharest, sept.1997; **F.F. Popescu**, Appl. Mag. Resonance, 19, 507-516 (2000); F.F. Popescu, J. Optoelectronic and Advanced Materials, 9, 2719-2723 (2007);**M. Oane, F. F. Popescu**, Shyh-Lin Tsao, F. **Scarlat, C. Oproiu, I. N. Mihailescu, A. Scarisoreanu**, Rom. Rep. Phys. 60, 361-369 (2008)

Grupuri importante din strainatate

Moshe Shapiro (Department of Chemistry at UBC Canada, Chemical Physics at the Weizmann Institute of Science, Rehovot Israel): "Coherent Control of Atomic, Molecular and Electronic Processes"(M. Shapiro and P. Brumer),in Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics, Vol. 42, pp. 287-343 (Academic Press, San Diego, 1999) B. Bederson and H. Walther – editors;"Principles of Quantum Control of Molecular Processes" (M. Shapiro and P. Brumer, John Wiley & Sons, 2003) ;P. Brumer and M. Shapiro, Principles and Applications of the Quantum Control of Molecular Processes, Wiley Interscience, Hoboken, New Jersey, 2003;Avi Pe'er, Evgeny A. Shapiro, Matthew C. Stowe, Moshe Shapiro and Jun Ye, Precise Control of Molecular Dynamics with a Femtosecond Frequency Comb, PHYSICAL REVIEW LETTERS 98, 113004, 2007;Kral P, Thanopoulos I, Shapiro M, Coherently controlled adiabatic passage, REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79, 53, 2007

Phil Bucksbaum (Stanford University -Department of Applied Physics, and Department of Physics, USA): "Controlling the Quantum World of Atoms, Molecules, and Photons", AMO2010 Committee, P.H. Bucksbaum and R.Eisenstein, co-chairs, : National Academies Press (2006);"Coherent Control of Pulsed X-ray Beams", M.F. DeCamp, D.A. Reis, P.H. Bucksbaum, B. Adams, J.M. Caraher, R. Clarke, C.W.S. Conover, E.M. Dufresne, R. Merlin, V. Stoica, and J.K. Wahlstrand, Nature, 413, 825-828(2001).

Hau L (Harvard University, USA):Lene Vestergaard Hau, Quantum physics - Tangled memories, Nature 452, 37-38 (2008);Naomi S. Ginsberg, Sean R. Garner, and Lene Vestergaard Hau, Coherent control of optical information with matter wave dynamics, Nature 445, 623 (2007).

Rabitz H (Princeton University, USA): Rabitz H, Focus on Quantum Control, New Journal of Physics 11 (2009) 105030

Stephen E. Harris,Stanford University, Stanford, California,Stephen E. Harris, Electromagnetically Induced Transparency, **Physics Today** 50 Issue 7 (1997)

MO Scully, H Walther,Max-Planck-Institut fuer Quantenoptik, D-8046 Garching bei Muenchen, GermanyMO Scully, H Walther, From lasers and masers to phaseonium and phasers, **Physics Reports** 219,191-201(1992)

T Taira and Y Sato, Inst Mol Sci, Ctr Laser Res, Okazaki, Aichi 4448585, Japan.

Subiectul 3.4. Interacțiunile atomilor cu câmpuri electromagnetice slabe

- **Realizari recente si perspective (la nivel international)**

Studiul proprietatilor atomilor si moleculelor in interactiune cu campul electromagnetic reprezinta o cercetare tematica in fizica atomica moderna. Modele clasice, semi-clasice, perturbative si ne-perturbative, au fost dezvoltate in scopul obtinerii acestor proprietati: forma liniei, timpul de viata al tranzitiei, saltul, structura starilor excitate. Metodele perturbative sunt foarte mult utilizate ele permitand studiul starilor cuantice cu numar cuantic orbital foarte mare. Bazate in general pe aproximatia Heisenberg pentru atomul de heliu, aproximatie in care unul din electronii exteriori unei paturi complete, este mult mai apropiat de electronii atomici (electron de valenta) in timp ce al doilea electron se afla pe paturi departate (electron Rydberg), metodele perturbative descriu perturbarea in formalismul functiei Green-Coulomb. Metodele ne-perturbative, folosesc in general descrierea Floquet a interactiunii sistem-atomic- camp electromagnetic. Metoda combinata a matricii R si a teoriei Floquet este cea mai performanta si descrie cel mai apropiat de realitate interactiunea si proprietatile sistemeleor in camp electromagnetic. Lucrarile stiintifice publicate de echipele de cercetare din Regatele Unite ale Marii Britanii, Scotiei si Irlandei de Nord (The Queen's University of Belfast, Dept. Of Appl. Math. And Theor. Phys., Oxford University) si din Belgia (Universite Libre de Bruxelles) coordonate de profesori renumiti: David Bates, A. Kingston, M Seaton, P.G. Burke, Ch. Joichain, sunt considerate definatorii pentru aceasta tematica

- **Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)**

Universitatea Bucuresti (UB)

Cercetarea de fizica atomica teoretica desfasurata la Universitatea din Bucuresti are o traditie indelungata si rezultate remarcabile, recunoscute pe plan international. In ultimii ani activitatile de cercetare de la Facultatea de Fizica i s-a adaugat cea desfasurata la Facultatea de Chimie, initiata si continuata de fosti doctoranzi in specializarea Fizica Teoretica.

Grupul de cercetare de la Facultatea de Fizica a realizat de-a lungul anilor diferite studii teoretice in domeniul interactiei atomilor unielectronici si al altor sisteme atomice simple cu radiatia electromagnetica, urmarind incadrarea intr-o tematica oglindind preocupari recente legate de progresele fizicii experimentale in ceea ce priveste domeniul spectral si caracteristicile surselor de radiatie precum si al tehnicilor de detectie a electronilor si fotonilor.

Au fost studiate o serie de **procese radiative fundamentale:**

1.1 Procese elementare implicand radiatie de intensitate joasa (efectul Compton la energii inalte, radiatia de franare, bremsstrahlung-ul dublu, ionizarea prin absorbtie de mai multi fotoni)

1.2 Procese atomice elementare modificate de prezenta unui camp laser (efectul fotoelectric asistat, efectul Compton si bremsstrahlung-ul asistat de un camp laser)

1.3 Interactia electronului cu pulsuri de radiatie electromagnetica de mare intensitate (efectul Compton neliniar si efectul Thomson neliniar)

1.4 Ionizarea sistemelor atomice simple in interactie cu pulsuri laser intense (regim neperturbativ). Generarea de armonice de ordin superior

Au fost dezvoltate **metode numerice** pentru

2.1 Integrarea numerica a ecuatiei Schrodinger temporala pentru atomi unielectronici in camp laser intens, in cadrul aproximatiei dipolare sau luand in considerare efectele de retardare

2.2 Extragerea distributiilor fotoelectronilor pe baza cunoasterii functiei de unda (in forma numerica)

2.3 Determinarea marimilor de baza cu care opereaza teoria Floquet (cuazienergii, component Floquet) pentru sisteme model unidimensionale si pentru atom in aproximatia unui singur electron activ

Au fost abordate alte subiecte apartinand **mecanicii cuantice**:

3.1 Evolutia in timp a unui sistem cuantic in vecinatatea unui prag energetic.

3.2 Descrierea in **mecanica cuantica relativista** a electronului in interactie cu o unda electromagnetica plana de intensitate arbitrara (Proprietatile solutiilor de tip Volkov ale ecuatiilor Dirac si Klein-Gordon. Generalizarea metodei translatiei spatiale din cazul nerelativist pentru studiul interactiei atomului unielectronic cu radiatia electromagnetica foarte intensa).

Prin cercetarile efectuate in ultimii 3 ani, legate de punctual 1.3 ne-am apropiat de un subiect abordat si mentionat in legatura cu experimentele ce vor fi efectuate in cadrul proiectului ELI .

Studiile teoretice de mecanica cuantica relativista permit abordarea comportarii electronilor si atomilor in campuri de intensitate extrema.

Lucrarile cele mai recente au fost realizate in cadrul unor contracte de cercetare cu CNCSIS, in particular in cadrul programului PN II- IDEI.

Alte teme de cercetare:

a) Interactia radiatiei electromagnetice cu sistemele atomice

Principalele subiecte abordate:

- Metoda functiei Green coulombiene pentru ecuatiile Schroedinger si Dirac;
- Obtinerea de formule analitice pentru distributia unghiulara a imprastierii Rayleigh pe electroni interiori (inner electrons);
- Obtinerea de formule analitice pentru sectiunile diferentiale ale imprastierilor inelastice Compton, Raman si ionizarea cu 2 fotoni;
- Deducerea expresiei analitice pentru sectiunea totala a efectului fotoelectric pe electroni interiori, cu considerarea corectiilor de multipoli, retardare si cinematica relativista.

b). Radiatia plamei de fuziune

Principalele subiecte abordate:

- Obtinerea de expresii analitice pentru recombinarea radiativa directa (DRR) si Bremsstrahlung;
- Calcularea ratei medii de recombinare si a puterii medii radiate prin DRR pentru plame cu diverse distributii dupa viteze ale electronilor;
- Calcularea puterii medii radiate prin Bremsstrahlung pe atomi cu grad inalt de ionizare.

c). Elaborarea de modele de ecranare pentru procese cu 2 fotoni

Principalele subiecte abordate:

- Obtinerea distributiei de sarcina pentru electroni interiori in atomi neutri sau cu grad inalt de ionizare si fitarea acesteia prin distributii coulombiene de sarcina, pentru diferite mecanisme de imprastiere.

- Calcularea parametrilor fizici pentru procesele de absorbtie si de radiatie pe electroni interiori cu considerarea efectelor de ecranare in atomi neutri sau cu grad inalt de ionizare.

Referinte (selectie relevanta)

1. **M. Boca, and V. Florescu**, *Thomson and Compton scattering with an intense laser pulse*, EPJD 61, 449–462 (2011).
2. **D. Victor**, A. Jensen and **G. Nenciu**, *Perturbationn of near threshold eigenvalues: Crossover from exponential to non-exponential decay laws*, Reviews in Mathematical Physics **23**, 83-125 (2011).
3. Pratt, RH; LaJohn, LA; **Florescu, V**; Suric, T; Chatterjee, BK; Roy, SC, *Compton scattering revisited*, Radiation Physics and Chemistry 79 , 124 (2010).
4. **M. Dondera**, *Atomic ionization by intense laser pulses of short duration: Photoelectron Energy and angular distributions*, Phys. Rev. A 82, 053419 (2010).
5. **M. Boca and V. Florescu**, *The completeness of Volkov spinors*, Rom. Journ. Phys. 55, 511 (2010).
6. **Boca, M, Florescu, V**, *Nonlinear Compton scattering with a laser pulse* Phys. Rev. A 80 , 053403 (2009).
7. Parker, JS; Armstrong, GSJ; **Boca, M**; Taylor, KT, *From the UV to the static-field limit: rates and scaling laws of intense-field ionization of helium.*, Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics 42 , (2009).
8. **V. Dinu**, A. Jensen, **G. Nenciu**, *Non-exponential decay laws in perturbation theory of near threshold eigenvalues*, J. Math. Phys. 50, 013516 (2009)
9. **M. Boca and V. Florescu**, *Relativistic effects in the time evolution of an one-dimensional model atom in a laser pulse*, Eur. Phys. J. D. 46, 15 (2008).
10. **O. Budriga and V. Florescu**, *Laser polarization effects on K-shell Compton scattering*, Eur. Phys. J. D. 41, 205 (2007).
11. **M. Dondera and V. Florescu**, *Bremsstrahlung in the presence of a laser field*, Rad. Phys. Chem. 75, 1380-1396 (2006).
12. **M. Dondera**, H. G. Muller, and **M. Gavrila**, *Observability of the dynamic stabilization of ground-state hydrogen with superintense femtosecond laser pulses*, Phys. Rev. A 65, 031405(R) (2002).
13. **Florescu, V; Gavrila, M**, *Extreme relativistic compton scattering by K-shell electrons*. PHYSICAL REVIEW A, 68 (5), p. , 2003.
14. *Rayleigh scattering on x-ray and γ -ray by 1s and 2s electrons in ions and neutral atoms*, **A. Costescu, K. Karim, M. Moldovan, S. Spanulescu and C. Stoica**, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS 44 (2011) 045204
15. *The second-order S-matrix element for the elastic scattering of photons by K-shell bound electrons: the nonrelativistic limit*, **Costescu, A; Spanulescu, S; Stoica**, JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS 402995-3014 2007
16. *Analytical treatment of high transcendental functions involved in perturbation theory for inner shell electrons interaction with gamma-ray* **Costescu, A;**

Spanulescu, S; Stoica, APPLIED AND COMPUTATIONAL MATHEMATICS, 2ND EDITION Book Series: Mathematics and Computers in Science and Engineering Pages: 374-380 Published: 2008

17. *Retardation, multipole, and relativistic kinematics effects for x- and gamma-ray Compton scattering from K-shell electrons,* **Costescu A, Spanulescu S.,** PHYSICAL REVIEW A Volume: 73, 022702,2006

1.

Preocupari apropiate apar in publicatiile unor cercetatori de la
Universitatea Pierre et Marie Curie, Paris
Centre des Lasers Intenses et Applications, Universite Bordeaux I, France
Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf, Dresden, Germany
Max-Planck-Institut fur Kernphysik, Heidelberg, Germany
School of Computing and Mathematics, University of Plymouth, United Kingdom
Atomic Physics, Fysikum, Stockholm University
The Ohio State University
Center for Free-Electron Laser Science, DESY, Hamburg, Germany

Tema 4. Ciocniri atomice și moleculare

Subiectul 4.1. Ciocniri atomice și moleculare cu particule încarcate, rapide. Teorie.

Universitatea Babeș-Bolyai (UBB) – Cluj

- **Realizari recente si perspective(la nivel international)**

-

Studiul interactiunilor între atomi sau molecule și particule încarcate rapide reprezintă un interes deosebit atât din punct de vedere practic, aplicativ dar și din punct de vedere teoretic. Pe de o parte, tehnicile experimentale pentru studiul dinamicii electronilor în interacțiuni atomice s-a dezvoltat spectaculos în ultima vreme. S-a dezvoltat tehnica COLTRIMS (Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy) [1], care a făcut posibilă realizarea experimentelor cinematic complete [2], analizând fiecare particula rezultată dintr-un proces de ciocnire atomică inelastică, cum ar fi ionizarea. Astfel se pot analiza în detaliu evenimentele care au loc la o scară atomică.

Efectele de interferență datorate caracterului ondulatoriu al electronilor în procesul de ionizare a moleculelor au fost puse în evidență experimental în ultimii ani [4-5]. Pe de altă parte, evoluția capacității tehnicii de calcul din ultimii ani, face posibilă efectuarea unor calcule numerice după modele noi, mai exacte și mai performante.

Aceste teme de cercetare fundamentală pregătesc terenul pentru aplicații practice extrem de importante. Cunoașterea exactă a proceselor care au loc în ciocnirea atomilor și a moleculelor cu ioni și electroni este esențială pentru modelarea plasmei termonucleare.

Fenomenele de interferenta, de importanta cruciala in teoria cuantica, pot avea aplicatii practice in producerea condensatelor Bose-Einstein, realizarea laserilor atomici, in masuratori de frecventa extrem de precise etc

Imediat dupa aparitia primelor rezultate experimentale pentru masurarea sectiunilor eficace total diferentiale de ionizare prin impact cu ioni rapizi [2], s-a dezbatut intens discrepanta dintre datele experimentale si calculele teoretice (se foloseste in primul rand metoda CDW-EIS), mai ales in planul perpendicular pe transferul de impuls. S-a sugerat, ca interactiunile dintre nuclee ar fi importante de luat in considerare in calcule [7], sau s-a accentuat importanta luarii in considerare a incertitudinilor datelor experimentale si necesitatea efectuarii unor convolutii a rezultatelor teoretice pe rezolutia experimentală [8]. Recent au aparut date experimentale si pentru studiul cinematic complet al ionizarii moleculei de deuteriu [10], importanta pentru plasma termonucleara.

Fenomenul de interferenta dintre undele asociate electronului este cunoscuta de mult, dar numai in ultimii ani s-a studiat teoretic si experimental interferenta aparuta in ionizarea moleculelor diatomice din cauza caracterului bicentric al orbitalului molecular [13]. S-a studiat coerenta si decoerenta acestor unde electronice [22]

1. J. Ullrich, *et al.*, J. Phys. B 30 (1997) 2917.
2. M. Schulz et al, Nature 422 (2003) 48.
3. R. Kienberger et al, Nature 427 (2004) 817.
4. N. Stolterfoht et al, Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 023201.
5. J-Y. Chesnel et al, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 100403.
6. C. Arcidiacono et al, Rad. Phys. Chem. 76 (2007) 431.
7. M.F. Ciappina, W.R. Cravero, J. Phys. B 39 (2006) 2183
8. J. Fiol et al, J. Phys. B 39 (2006) L285
9. **L. Nagy**, F. Jarai-Szabo and S. Fritzsche, J. Phys. B 38 (2005) 141
10. G. Laurent et al, Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 173201
11. **L. Nagy**, L. Kocbach, K Póra and J.P. Hansen, J Phys. B 35 (2002) L453.
12. N. Stolterfoht et al, Phys. Rev. A 67 (2003) 030702
13. N. Stolterfoht et al, Phys. Rev. A 69 (2004) 012701
14. K. Póra and **L. Nagy**, Nucl. Instr. Meth. B 233 (2005) 293.
15. D.S. Milne-Brownlie et al, Phys. Rev. Lett. 96 (2006) 233201
16. P.Q. Wang et al, Phys. Rev A 74 (2006) 043411
17. J.S. Prauzner-Bechcicki et al, Phys. Rev. Lett. (2007) 203002
18. A. Placios et al, Phys. Rev. A 75 (2007) 013408
19. J. Fernandez et al, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 98
20. K.L. Ishikawa, Phys. Rev. A 74 (2006) 023806
21. **L. Nagy**, S. Borbély and K. Póra, Phys. Lett. A 327 (2004) 481.
22. B. Zimmermann et al, Nature Physics 4 (2008) 649.

- **Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (de viitor);**

Grupul condus de L. Nagy la UBB a avut rezultate semnificative in studiul tranzitilor multielectronice in atomi si molecule in impact cu particule incarcate rapide. Au descris

tranzitiile dielectronice in atomul de heliu [1] si in atomul de litiu [5] luand in considerare si studiind efectele de corelatie electronica in procesul de ionizare cu excitare si excitare dubla. Au elaborat o metoda semiclassicala pentru calcularea sectiunilor eficace de ionizare total diferentiale. Rezultatele au confirmat structurile observate experimental in spectrul electronului ejectat in planul perpendicular pe transferul de impuls [8,10], performanta nereusita de multe alte teorii.

In legatura cu fenomenele de interferenta care apar in spectrul energetic al electronului ejectat la ionizarea moleculelor, grupul de cercetare a dat o descriere teoretica analitica in cazul moleculei de hidrogen [2], care a prevazut dependenta fenomenului de interferenta de unghiul de ejectare a electronului. Aceasta dependenta ulterior s-a confirmat experimental. Intre timp s-au observat si alte structuri de interferenta de ordin superior, care au fost descrise partial de grupul din Cluj [6], si nici un alt grup nu a reusit o descriere teoretica. S-a analizat si situatia diferita in cazul moleculei de azot (anularea interferentelor de ordinul intai) [9], si s-a studiat acesta interferenta si pentru diferite orientari ale axei moleculare [11].

Referinte (selectie relevanta)

1. Improved calculation for the ionization-excitation of the helium, **L. Nagy** and A. Benedek, J. Phys B 35 (2002) 491-499.
2. Interference effects in the ionization of H₂ by fast charged projectiles, **L. Nagy**, L. Kocbach, K Póra and J.P. Hansen, J Phys. B 35 (2002) L453-L459.
3. Interference effects in the photoionization of molecular hydrogen, **L. Nagy**, S. Borbély and K. Póra, Phys. Lett. A 327 (2004) 481-489.
4. Ionization-excitation of lithium by fast charged projectiles, **L. Nagy**, F. Járai-Szabó and S. Fritzsche, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 38 (2005), 141.
5. Correlation effects for double K-shell vacancy production in lithium by fast charged projectile impact, F. Járai-Szabó, **L. Nagy** and S. Fritzsche, Nucl. Instr. Meth. B 233 (2005), 276.
6. Interference effects in the differential ionization cross section of H₂ by H⁺ impact, K. Póra and **L. Nagy**, Nucl. Instr. Meth. B 233 (2005), 293.
7. Interference effects in the ionization of diatomic molecules, **L. Nagy**, S. Borbély and K Póra, Brazilian Journal of Physics 36 (2006) 511.
8. Semiclassical description of kinematically complete experiments, F. Járai-Szabó and **L. Nagy**, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40 (2007) 4259-4267.
9. Suppression of primary electron interferences in the ionization of N₂ by 1–5-MeV/u protons, Baran J. L., Das S., Jarai-Szabo Ferenc, Pora Melinda Katalin, **Nagy Ladislau**, Tanis J. A., Phys. Rev. A 78 (2008) 127101-127105.
10. Impact parameter method calculations for fully differential ionization cross sections, F. Járai-Szabó, L. Nagy, Nucl. Instr. Meth. B 267 (2009) 292-294.
11. Molecular orientation influence on the interference pattern, K. Póra, **L. Nagy**, Nucl. Instr. Meth. B 267 (2009) 292-294.

Grupuri din străinătate:

R. Rivarola (Univ. Rosario, Argentina)
E. Lindroth (Univ. Stockholm, Sweden)
J. Macek (Oak Ridge Natl Lab, USA)
J. Burgdorfer (Tech. Univ. Vienna, Austria)
A. Voitkiv (Max Planck Institut für Kernphysik, Heidelberg)

Subiectul 4.2. Ciocniri electron-atom si electron-molecula – experiment

- Realizari recente si perspective(la nivel international)

Cercetarile recente care implica experimente de ciocnire electron-atom si electron-molecula sunt in marea lor majoritate axate pe dezvoltari de spectrometrie de masa atat la nivel constructiv cit si la nivel de aplicatii in domeniul structurilor moleculare. Lucrarile aparute cuprind aplicatii in domeniile stiintifice: chimie, fizica, geologie, biologie sanatare si stiintele vietii. Subiectele fundamentale includ principii instrumentale, structura si proprietati fizico chimice a ionilor in faza gazoasa, studii de proprietati termodinamice, mecanisme de ionizare, teoria fragmentarii ionilor, ioni cluster si suprafete de energie potentiala. Subiectele aplicative sunt axate pe studii structurale, secventa de biopolimeri, dezvoltare si validare de noi metodologii si pe masuratori in domeniul cercetarilor de mediu si impact asupra sanatatii.

Realizarile ultimilor ani leagare de aplicatiile spectrometriei de masa au fost axate pe studii biologice in special studii de proteine si caracterizarea de macromolecule cu structura complexa. Studiile bazate pe mobilitatea ionilor au devenit preocuparile de baza in analiza ionilor in faza gazoasa de origine biologica. S-a constatat ca separarea ionilor bazata pe sectiunea de ciocnire este foarte eficienta intr-un spectrometru cu timp de zbor relativ la separare bazata pe raportul masa pe sarcina.

Realizari importante au fost obtinute prin realizarea de instrumente de foarte inalta sensibilitate prin aplicarea separarii ionilor prin sisteme Ion Trap (Ion Trap Mass Spectrometry). In acest mod s-au obtinut sensibilitati care permit efectuarea de cercetari structurale pe compusi aflati in matrici complexe cum este cazul probelor specifice cercetarii mediului.

- Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (de viitor);

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculate (ITIM)- Cluj

**Departamentul de spectrometrie de masa, cromatografie si fizica aplicata
(Dr. Zaharie Moldovan)**

Teme de cercetare

1) Aplicatii ale spectrometrie de masă si cromatografiei in domeniile: mediu, medicina, siguranta alimentara, industrie, geologie.

Grup de cercetare: Dr. Zaharie Moldovan, C.S. Scmutzer Gabriella, C. S. Veronica Avram, C. S. Florina Tusa, A.C. Olivian Marincas,

Subiecte abordate:

- 1.1. Determinari structurale si cantitative la compusi din mediu, alimente si tesuturi biologice;
- 1.2. Studii de materiale fotocatalitice inovative aplicate la decontaminarea chimica si microbiologica a aerului din incinte;
- 1.3. Metode moderne de investigare, autentificare, conservare si punere in valoare a obiectelor de arta din patrimoniul national;
- 1.4. Studii de optimizare si modernizare a statiilor de tratament al apelor reziduale municipale.
- 1.5. Determinari de puritate la substante complexe.

2) Aplicatii ale izotopilor stabili. Cercetari pe baza de rapoarte izotopice in hidrologie, ecofiziologie si autentificari de alimente.

Grup de cercetare: Dr. Alina Magdas, Dr. Cristea Gabriella, C. S. Romulus Puscas

Subiecte abordate:

- 2.1. Determinari de concentratii de deuteriu si ^{18}O din probe de apa precum si din probe biologice;
- 2.2. Studii si cercetari de hidrologie izotopica (provenienta apelor subterane sau de suprafata, amestecari de ape, stratificarea orizontala si verticala a apelor din punct de vedere izotopic, interactiunea apelor de suprafata cu apele subterane, modele holistice de circulatie a apelor subterane);
- 2.3. Studii si cercetari care implica utilizarea deuteriului ca trasor natural in sisteme biologice sau in circuitul natural al apei;
- 2.4. Cercetari cu ajutorul izotopilor stabili in domeniul alimentatiei, aplicatii legate de calitatea si managementul alimentelor si bauturilor precum si de bioresurse alimentare;
- 2.5. Elaborarea de noi metode de analiza izotopica pentru autentificarea si trasabilitatea alimentelor (uleiuri, sucuri de fructe, miere, ape minerale).

3) Aplicatii ale spectrometriei de masa cu plasma cuplata inductiv

Grup de cercetare: Dr. Cezara Voica, C. S. Adriana Dehelean, C. S. Zoltan Balasz,

Subiecte abordate:

- 3.1. Masuratori de urme de metale grele in probe de apa si sol;
- 3.2. Determinari de metale in probe de origine vegetala;
- 3.3. Masuratori de distributii izotopice.

- Referinte (selectie relevanta)

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare (ITIM)- Cluj

1. Electron Ionisation and Positive-ion Chemical Ionisation Mass Spectra of N-(2-Hydroxyethyl)alkylamides, **Z. Moldovan**, Cristina Maldonado and J. M Bayona, *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 11, 1077-1082 (1997.)

2. The Mass Spectral Analysis of several Hydrazine Derivatives, **Z. Moldovan**, O. Garlea, Teodora Panea, Alina Pop, Daniela Zinveliu and Lucia Bodochi, *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 12,1313-1318 (1998).
3. Mass Spectral Study of the Fragmentation Pathways for Some New Thiophosphororganic Molecules, Monica Culea, N. Palibroda, **Z. Moldovan**, Simona Nicoara, I. Fenesan, Rodica Popescu, Viorica Muresan, Eugenia Postoiu and V. Znamirovski, *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, 12, 1808-1812 (1998).
4. Determination of novel aromatic amines in environmental samples by Gas Chromatography/Mass Spectrometry, **Z. Moldovan** and J. M. Bayona, *Rapid Comm. Mass Spectrom.* 14 (6), 379-389 (2000).
5. Electron Impact Mass Spectral Interpretation for some thiophosphoryl-p-acetylaminobenzensulfonamides, I. Fenesan, R. Popescu, C. T. Supuran, S. Nicoara, M. Culea, N. Palibroda, **Z. Moldovan**, O. Cozar, *Rapid Comm. Mass Spectrom.* 15, 721-729 (2001).
6. Systematic characterisation of long-chain aliphatic esters of wool wax by gas chromatography/mass spectrometry in the electron impact mode , Z. Moldovan, E. Jover and J. M. Bayona, *J. Chromatogr. A*, 952(2002) 193-204.
7. Complete characterisation of lanolin steryl esters by sub-ambient pressure gas chromatography mass spectrometry in the electron impact and chemical ionisation modes, E. Jover, **Z. Moldovan** and J. M. Bayona, *J. Chromatogr. A*, 970(2002) 249-258
8. Gas chromatographic and mass spectrometric methods for characterisation of long chain fatty acids. Application to wool wax extracts, **Z. Moldovan**, E. Jover and J. M. Bayona, *Analytica Chimica Acta*, 465, 359-378(2002)
9. Occurences of pharmaceutical and personal care products as micropollutants in rivers from Romania, **Zaharie Moldovan**, *Chemosphere*, 64 (2006) 1808-1817
10. Structural Elucidation of organic contaminants by chemical ionisation mass spectrometry, **Z. Moldovan**, *Journal of Physics: Conference Series* 182 (2009) 012041
11. The determination of the linear alkylbenzene sulfonate isomers in water samples by gas-chromatography/mass spectrometry **Z. Moldovan**, V. Avram, O. Marincas, P. Petrov. Th. Ternes, *J. Chromatography A*, 1218 (2011) 343-349
12. New solid form of Norfloxacin: Structural studies, I. Bratu, G. Borodi, Iren Kacso, **Z. Moldovan**, C. Filip, Felicia Dragan, M. Vasilescu and S. Simion, *Spectroscopy* 25 (2011) 53-62

Grupuri din strainatate

Cris Laphorn (Pfizer Global Research and Development, Sandwich, Kent, UK);
 Juri Timonen (University of Joensuu, Joensuu, Finland);
 Richard D. Bowen (University of Bradford, Bradford, UK).
 Lutz F. Tietze (University of Göttingen, Germany)
 Scott Gronert (San Francisco State University, USA)
 Aain Dorsselaer (Laboratory of Bio-Organic Mass Spectrometry, Strasbourgh, France)
 Anne Maria Bulanger (University of Ottawa, Canada).
 Gianluca Giorgi (University of Siena, Italy)
 Keniki Iwamoto (Osaka University, Japan)
 Jurgen Grotemeyer (University of Kiel, Germany).
 Detlef Schroeder (Technical University of Berlin. Germany)

Einar Uggerud (University of Oslo, Norway);
Dietmar Kuck (University of Bielefeld, Germany);
Olli Martiskainen (University of Turku, Finland)

Subiectul 4.3. Interactiunea atomilor si a moleculelor cu fascicul de electroni si pozitroni – teorie

- Realizari recente si perspective(la nivel intenational)

The charged projectile–atomic or molecular target interactions are widely studied for their fundamental importance in understanding electron dynamics, but also have practical applications in astrophysics, plasma modeling, interaction of radiation with matter, medical diagnosis etc. We will mainly focus on positron-molecule interactions, which became very important in the context of the application on a wide scale of the positron emission tomography (PET) medical technique and positron spectroscopy. New experiments in positron-molecule interactions performed by the group in UCL provide an exciting task for theoretical description (positronium formation, positronium scattering, direct ionization by positrons etc). As for the electron-molecule interactions are concerned, the study of fully differential cross section leads to a better understanding of the electron dynamics.

- Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (de viitor);

a) Interactiunea pozitron-molecula si electron-molecula

a) Universitatea Babes-Bolyai (UBB) –Cluj

Grupul de la UBB a elaborat o metoda pentru calcularea sectunii eficace totale si diferentiale pentru ionizarea moleculelor prin impact cu pozitroni si electroni. Metoda se bazeaza pe DWBA, in timp ce functia de unda moleculara este reprezentata prin gaussiene. Aceasta functie de unda este dezvoltata in serie dupa polinoamele Legendre sau armonicele sferice. Se preconizeaza imbunatatirea metodei si extinderea sa pentru formarea de pozitroniu.

- Referinte (selectie relevanta)

1. The effect of target representation in positron-impact ionization of molecular hydrogen, R.I. Campeanu, V. Chis, **L. Nagy** and A.D. Stauffer, Phys. Lett. A 310 (2003) 445-450.
- 2., Near-threshold ionization of atoms and molecules by positron impact, R.I. Campeanu, **L. Nagy** and A.D. Stauffer, Canadian J. Phys 81 (2003) 919-927.
3. Positron impact ionization of molecular oxygen, R.I. Campeanu, V. Chis, **L. Nagy** and A.D. Stauffer, Phys. Lett. A 325 (2004) 66-69.

4. Positron impact ionization of molecular nitrogen, R.I. Campeanu, V. Chis, **L. Nagy** and A.D. Stauffer, Nucl. Instr. Meth. B 221 (2004) 21-23.
5. Positron impact ionization of CO and CO₂, R.I. Campeanu, V. Chis, **L. Nagy** and A.D. Stauffer, Phys. Lett. A 344 (2005) 247.
6. Positron impact ionization of CH₄, R.I. Campeanu, V. Chis, **L. Nagy** and A.D. Stauffer, Nucl. Instr. Meth. B 247 (2006) 58.
7. Screening effects in the ionization of molecules by positrons, I. Tóth, R.I. Campeanu, V. Chis and **L. Nagy**, Physics Letters A, 360 (2006) 131.
8. Electron impact ionization of diatomic molecules, Toth Istvan Ferenc, Campeanu Radu I, Chis Vasile, **Nagy Ladislau**, Eur. Phys. J. D 48 (2008) 351-354.
9. Distorted-wave Born approximation for the ionization of molecules by positron and electron impact, I Tóth, R.I. Campenu, V Chis and **L. Nagy**, Nucl. Instr. Meth. B 267 (2009) 362-365.
10. Ionization of the water molecule by electron and positron impact, **I. Toth**, R. I. Campeanu, V. Chis, **L. Nagy**, Journal of Physics: Conference Series 199 (2010) 012018
11. Triple-differential cross-section calculations for the ionization of CH₄ by electron impact, **I. Toth**, **L. Nagy**, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 (2010) 135204

Grupuri din străinătate:

Curtin Univ Technol, Ctr Antimatter Matter Studies (Bartschat K)

1. Electron collisions with copper atoms: Elastic scattering and electron-impact excitation of the (3d(10)4s)S-2 -> (3d(10)4p)P-2 resonance transition Author(s): Zatsarinny O, Bartschat K Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 82 Issue: 6 Article Number: 062703 Published: DEC 7 2010
2. Differential cross sections for electron impact excitation of the n=2 states of helium at intermediate energies (80, 100 and 120 eV) measured across the complete angular scattering range (0-180 degrees)
Author(s): Ward R, Cubric D, Bowring N, et al. Source: JOURNAL OF PHYSICS B- ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 44 Issue: 4 Article Number: 045209 Published: FEB 28 2011
3. Near-threshold electron impact excitation of the argon 3p(5)4s configuration-new and revised normalized differential cross sections using recent time-of-flight measurements for normalization
Author(s): Khakoo MA, Zatsarinny O, Bartschat K Source: JOURNAL OF PHYSICS B- ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 44 Issue: 1 Article Number: 015201 Published: JAN 14 2011
4. Electron-Impact Excitation and Ionization of Complex Atoms Author(s): Bartschat K Conference Information: 26th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, JUL 22-28, 2009 Western Michigan Univ, Kalamazoo, MI Source: XXVI INTERNATIONAL CONFERENCE ON PHOTONIC, ELECTRONIC AND ATOMIC COLLISIONS Book Series: Journal of Physics Conference Series Volume: 194 Pages: - Published: 2009

Univ Missouri, Rolla, USA (Don Madison)

1. Title: Dynamical (e, 2e) studies using tetrahydrofuran as a DNA analog

- Author(s): Colyer CJ, Bellm SM, Lohmann B, et al. Source: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 133 Issue: 12 Article Number: 124302 Published: SEP 28 2010
2. Title: Tracing multiple scattering patterns in absolute (e,2e) cross sections for H-2 and He over a 4 pi solid angle Author(s): Ren X, Senftleben A, Pfluger T, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 82 Issue: 3 Article Number: 032712 Published: SEP 27 2010
 3. Title: Theoretical fully differential cross sections for double-charge-transfer collisions Author(s): Harris AL, Peacher JL, Madison DH Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 82 Issue: 2 Article Number: 022714 Published: AUG 26 2010
 4. Title: Fivefold differential cross sections for ground-state ionization of aligned H-2 by electron impact Author(s): Senftleben A, Al-Hagan O, Pfluger T, et al. Source: JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 133 Issue: 4 Article Number: 044302 Published: JUL 28 2010
 5. Title: Search for interference effects in electron impact ionization of aligned hydrogen molecules Author(s): Senftleben A, Pfluger T, Ren X, et al. Source: JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 43 Issue: 8 Article Number: 081002 Published: APR 28 2010
 6. Title: Electron-impact-ionization cross sections of H-2 for low outgoing electron energies from 1 to 10 eV Author(s): Al-Hagan O, Murray AJ, Kaiser C, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 81 Issue: 3 Article Number: 030701 Published: MAR 2010
 7. Title: Low-energy symmetric coplanar and symmetric non-coplanar (e, 2e) studies from the 3a(1) state of H2O Author(s): Nixon KL, Murray AJ, Al-Hagan O, et al. Source: JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 43 Issue: 3 Article Number: 035201 Published: FEB 14 2010
 8. Title: (e, 2e) study of two-center interference effects in the ionization of N-2 Author(s): Hargreaves LR, Colyer C, Stevenson MA, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 80 Issue: 6 Article Number: 062704 Published: DEC 2009
 9. Title: Four-body model for transfer excitation Author(s): Harris AL, Peacher JL, Madison DH, et al. Source: PHYSICAL REVIEW A Volume: 80 Issue: 6 Article Number: 062707 Published: DEC 2009
 10. Title: Dynamical (e, 2e) studies of formic acid Author(s): Colyer CJ, Stevenson MA, Al-Hagan O, et al. Source: JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 42 Issue: 23 Article Number: 235207 Published: DEC 14 2009

York University, Toronto, Canada (R. I. Campeanu)

1. Title: Positron-impact ionization of atoms and molecules Author(s): Campeanu RI Conference Information: 4th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems, JUN 18-20, 2008 Cluj Napoca, ROMANIA Source: NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH

MATERIALS AND ATOMS Volume: 267 Issue: 2 Pages: 239-243 Published: JAN 2009

2. Title: ECC study in positron impact ionization of helium

Author(s): Benedek A, Campeanu RI Conference Information: 14th International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics, AUG 01-04, 2007 Univ Reading, Reading, ENGLAND

Source: NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS Volume: 266 Issue: 3 Pages: 407-409 Published: FEB 2008

3. Title: Triply differential study of positron-impact ionization of H-2 Author(s): Benedek A, Campeanu RI Conference Information: 14th International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics, AUG 01-04, 2007 Univ Reading, Reading, ENGLAND Source: NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS Volume: 266 Issue: 3 Pages: 458-461 Published: FEB 2008

5. Title: Electron impact ionization of He, Ne and Ar Author(s): Campeanu RI Source: PHYSICS LETTERS A Volume: 365 Issue: 1-2 Pages: 122-125 Published: MAY 21 2007

6. Title: Molecular 3C approximation for the ionization of H-2 by positron impact Author(s): Benedek A, Campeanu RI Source: JOURNAL OF PHYSICS B-ATOMIC MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS Volume: 40 Issue: 8 Pages: 1589-1596 Published: APR 28 2007 Times Cited: 6

b) Interactiunea electron-ion molecular

Universitatea Bucuresti

Determinarea parametrilor cinetici ai plasmelor reci prezente in diferite medii de interes fundamental sau tehnologic [1,2] (nori moleculari interstelari, supernove, atmosfere planetare, motoare cu ardere interna asistata de plasma, medii depoluante ce contin plasma, stratul de plasma ce apare in fata navelor supersonice, plasma periferica de fuziune) se bazeaza pe cunoasterea sectiunilor eficace si a ratelor proceselor de ciocnire sau a proceselor radiative. Un proces important in cadrul proceselor de ciocnire ce au loc in plasmele reci este ciocnirea dintre un electron si un ion molecular.

In ciocnirile dintre un electron de energie joasa (sub pragul de disociere al ionului molecular) si un ion molecular diatomic recombinarea disociativa este procesul dominant. Recombinarea disociativa consta in captura electronului intr-o stare disociativa dublu excitata a moleculei neutre astfel formata (procesul direct) si captura temporara intr-o stare Rydberg a moleculei neutre urmata de predisocierea in aceeasi stare disociativa dublu excitata a moleculei neutre (procesul indirect). Aceste 2 mecanisme interfera cuantic in asa numitul proces total. Cu cresterea energiei electronului incident, cand energia acestuia este deasupra pragului de disociere a ionului are loc procesul de excitare disociativa. Aceasta consta in autoionizarea intr-o stare antibonding excitata a ionului molecular. Autoionizarea este un proces competitiv in raport cu captura electronului, conducand la imprastierea elastica, excitarea si dezexcitarea vibrationala.

Metodele teoretice cele mai utilizate sunt metoda defectului cuantic multicanal (MQDT) [3,4] si metoda pachetului de unda (TDWP) [5]. Cele 2 metode se aplica pentru domenii diferite ale energiei electronului incident permitand astfel studierea unui numar mare de procese de ciocnire electron-ion molecular. Metoda MQDT este eficienta la energii joase ale electronului incident, caz in care metoda TDWP nu poate fi aplicata. Metoda MQDT presupune interferenta cuantica a 2 procese: procesul direct, captura rezonanta a electronului intr-o stare disociativa si procesul indirect ce consta intai in captura electronului pe o stare vibrationala Rydberg excitata urmata de disocierea moleculei formate in urma capturii electronice. Metoda TDWP consta in integrarea ecuatiei Schrodinger dependente de timp si propagarea pachetului de unda pe suprafata unui potential complex. Ea se aplica sistemelor moleculare poliatomice si determina evolutia temporala a populatiei nivelelor vibrationale. Metoda defectului cuantic multicanal (MQDT) se aplica ionilor moleculari diatomici. Ea prezinta avantajul unei tratari unitare a tuturor proceselor competitive ce au loc la ciocnirea electron-ion molecular: recombinarea disociativa, excitarea vibrationala, dezexcitarea vibrationala, excitarea disociativa.

Ciocnirile dintre electroni si ionii moleculari au fost studiate mult in ultimii 20 de ani [6,7], atat experimental cat si teoretic. In ciuda acestui fapt nu exista inca un acord foarte bun intre rezultatele teoretice si cele experimentale. Acest lucru se datoreaza complexitatii procesului. Un aspect important de care trebuie sa se tina seama il reprezinta sensibilitatea mare a valorii sectiunii eficace fata de starea initiala a ionului molecular. Din punct de vedere al calculului numeric bazat pe metoda MQDT, trebuie mentionata sensibilitatea mare a valorii sectiunii eficace fata de datele moleculare de intrare, respectiv defectul cuantic si cuplajele electronice. Pentru calculele numerice imbunatatirea datelor moleculare a ramas inca o problema de rezolvat.

Grupul si-a adus contributiile la studiul excitarii disociative a ionului molecular H_2^+ si a izotopomerilor

sai [8-11]. *Contributiile originale ale studiului efectuat pana acum constau in*

- expresia analitica pentru matricea de reactie K asociata procesului de ciocnire a ionilor moleculari biatomici cu electroni a caror energie este mai mare decat energia de disociere a ionului molecular.

Rezultate publicate in "Dissociative Excitation in Electron Collisions with HD^+ , M. Fidirig and M. Stroe, Phys. Scr. 78 (2008) 065302.

- coduri numerice originale de calcul a sectiunilor eficace de excitare disociativa (si ale celorlalte procese competitive) atat pentru cazul nerotational cat si pentru cel rotational.

- rezultate numerice noi (obtinute cu codurile numerice proprii) pentru sectiunile eficace si ratele de excitare disociativa (si ale celorlalte procese competitive) pentru H_2^+ si izotopomerii sai. Rezultate raportate in cele 8 articole publicate sau acceptate in perioada 2008-2011.

Referinte (selectate)

1. R K Janev, Atomic and Molecular Processes in Fusion Edge Plasmas, Plenum, New York (1995)
2. A Wolf, L Lammich and P Schmelcher (editors) Sixth International Conference on Dissociative Recombination: Theory, Experiments and Applications, J Phys: Conference Series, 4 (2005)
3. A Giusti-Suzor, J Phys B, 13, 3867 (1980)

4. S Guberman and A Giusti-Suzor, J Chem Phys, 95, 2602 (1991)
5. T N Rescigno, C W McCurdy, A E Orel, B H Lengsfeld, Computational Methods for Electron-Molecule Collisions, ed W M Huo and F A Gianturco (Plenum) (1995)
6. A I Florescu-Mitchell, J B A Mitchell, Phys Rep, 430, 277 (2006)
7. M. Larsson and A Orel, Dissociative recombination of molecular ions, Cambridge University Press, Cambridge (2008)
8. M. Fifirig, M. Stroe, Phys Scr, 78, 065302, (2008)
9. M. Stroe, M. Fifirig, Phys Lett A, 373, 4152-4157, (2009)
10. M. Stroe, M. Fifirig, J Phys B-At Mol Phys, 42, 205203, (2009)
11. M. Fifirig, M. Stroe, J Phys B-At Mol Phys, acceptata (2011)

Tema 5. Macromolecule și clusteri

Subiectul 5.1. Macromolecule de interes biologic, polimeri, grafenă: teorie, modelare și simulare

- **Realizari recente si perspective(la nivel intenational)**

Realizarea unor platforme performante de obtinere de noi materiale micro si-sau nano structurate functionale, cu aplicatii in biosenzoristica si domenii bio-medicale prezinta un nivel ridicat de interes atat pe plan national cat si international.

Domeniile vizate sunt interdisciplinare si implica sinteza si depunerea de filme subtiri organice si anorganice, obtinerea de matrici de elemente active din materiale anorganice, polimerice sau de compusi biologici pentru realizarea controlata de biointerfete , integrarea de sisteme miniaturizate de microfluidica, dar si de analiza.

In aceasta directie se disting metodele bazate pe laseri pentru procesarea de suprafete, matrici la nivel nano si micrometric.

Cercetarile din domeniu cuprind urmatoarele tendinte: a) elucidarea aspectelor fizice si chimice implicate in procesarea laser; b) extinderea proceselor PLD (depunere laser pulsata), MAPLE (evaporare laser pulsata asistata de matrice) si LIFT (transfer indus laser) la alte materiale de interes biologic (de ex. proteine, enzime, etc.); c) elaborarea unor procese, sisteme si tehnici noi bazate pe laser pentru obtinerea de noi materiale.

Contributie romaneasca (recenta) si obiective propuse (viitor)

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele

Prin combinarea de diverse tehnici laser (ex. PLD, MAPLE, LIFT, polimerizare multifotonica), cu proprietatile speciale ale compusilor biologici si polimerici si chimia suprafetelor se pot obtine noi structuri (2D cat si 3D) cu aplicatii atat in biosenzoristica cat si in domenii conexe medicale. Realizarile pe plan national includ:

- Obtinerea si caracterizarea morfostructurala de filme subtiri de tip metalic prin PLD sau de tip polimeric prin MAPLE cu aplicabilitate in prostetica

- Verificarea formării de biofilme pe suprafața acestora și verificarea in vitro a biocompatibilității utilizând linii celulare animale
- Studiul eliberării de elemente nocive (ex: Ni) în mediul de cultură pe parcursul experimentelor
- Verificarea modificării structurale și a coroziunii filmelor metalice
- Obținerea de microstructuri de tip polimeric sau biologic
- Optimizarea parametrilor implicați în transferul indus cu laserul pentru obținerea de structuri în mod repetitiv
- Cuantificarea procesului din punct de vedere al activității biologice în cazul transferului de biomolecule

Obiective propuse:

În strategia de dezvoltare sunt incluse:

- investigarea mecanismelor de transfer a polimerilor și compusilor biologici (de ex. proteine și lipozomi) și corelarea proprietăților acestor materiale (funcționalitate) cu condițiile experimentale;
- extinderea procedurilor de obținere elaborate la alte materiale polimerice (pentru aplicații în senzorială), compusi biologici
- îmbunătățirea sistemelor deja existente pentru obținerea array-urilor, biosenzorilor, etc.
- noi tipuri de bio-structuri, inclusiv celulare, integrate platformelor senzorială;

exemple practice de utilizare a biosenzorilor, inclusiv din perspectiva economică

- **Referințe (selectie relevantă)**

1. **V. Dinca, A. Palla-Papavlu, I. Paraico, T. Lippert, A. Wokaun, M. Dinescu**, 2D spatially controlled polymer micro patterning for cellular behavior studies, *Applied Surface Science*, Volume 257, Issue 12, 5250 - 5254, (2011)
2. **A. Palla-Papavlu, I. Paraico, J. Shaw-Stewart, V. Dinca, T. Savopol, E. Kovacs, T. Lippert, A. Wokaun, M. Dinescu**, Liposome micropatterning based on laser induced forward transfer, *Applied Physics A*, Volume 102, No. 3, 651-659 (2011)
3. **A. Palla-Papavlu, V. Dinca, I. Paraico, A. Moldovan, J. Shaw-Stewart, C. W. Schneider, E. Kovacs, T. Lippert, M. Dinescu**, Microfabrication of polystyrene microbead arrays by laser induced forward transfer, *Journal of Applied Physics*, 108, 033111, (2010)

Institutul National C-D pentru Fizica si Inginerie Nucleara _Horia Hulubei (IFIN-HH) –Magurele

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare - Cluj

1. Marian Apostol, National Institute of Physics and Nuclear Engineering - Horia Hulubei, Laboratory of Condensed Matter and Theoretical Physics,
2. Attila Bende, National Institute for R&D of Isotopic and Molecular Technologies, Department of Molecular and Biomolecular Physics
3. C. Postolache, National Institute for Physics and Nuclear Engineering 'Horia Hulubei', Atomistilor Street 407, Magurele, Romania

Subiectul 5.2. Calculul structurii, proprietăților termodinamice și spectroscopice ale clusterilor moleculari. Dinamica moleculară

- **Realizari recente si perspective(la nivel intenational)**

Molecular clusters offer the unique possibility to investigate the evolution of physical and chemical properties of matter with the size of the nanoparticle, starting from the individual molecule. In this "cluster regime" many properties change irregularly in a non-scalable manner with the number of molecules. Here, chemistry may be dramatically different from what is known in the macroscopic, "bulk" limit.

Innovations in both the experimental techniques and the theoretical methods available for studying cluster behavior have been crucial in stimulating new activities emerging in this field. A particularly promising avenue that we are pursuing involves materials design through cluster assembly often referred to as the "next frontier" in the field of nanoscience. Synergism arising from combined efforts in experiment and theory is serving to unravel new features specific to the reduced size dimensions and is opening new opportunities.

- **Contributie romaneasca**

Universitatea Babeș-Bolyai (UBB) – Cluj

T.A. Beu - Structure, spectroscopy and reactive processes of fullerenes and molecular clusters

Referinte (selectate)

1. C. Steinbach, U. Buck, T.A. Beu, Infrared spectroscopy of large ammonia clusters as a function of size, *J. Chem. Phys.* 125, 133403 (2006).
2. T.A. Beu, "Molecular dynamics simulations of ion transport through carbon nanotubes I: Influence of geometry, ion specificity and many-body interactions", *J. Chem. Phys.* 132, 164513 (2010).
3. C. Steinbach, U. Buck, T.A. Beu, "Infrared spectroscopy of large ammonia clusters as a function of size", *J. Chem. Phys.* 125, 133403 (2006).
4. C. Steinbach, P. Andersson, J. K. Kazimirski, U. Buck, V. Buch, T.A. Beu, "Infrared Predissociation Spectroscopy of Large Water Clusters: A Unique Probe of Cluster Surfaces", *J. Phys. Chem. A* 108, 6165-6174 (2004).
5. T.A. Beu, "Fragmentation statistics of large H₂O and NH₃ clusters from molecular-dynamics simulations", *Phys. Rev. A* 67, 045201 (2003).
6. T.A. Beu, C. Steinbach, U. Buck, "Intermolecular vibrations of large ammonia clusters from helium atom scattering", *J. Chem. Phys.* 117, 3149-3159 (2002).
7. A. Bende, I. Grosu and I. Turcu: "Molecular Modeling of Phenothiazine Derivatives: Self-Assembling Properties", *Journal of Physical Chemistry A*, 114(47), 12479 - 12489 (2010).
8. Antony, J., Grimme, S., Structures and interaction energies of stacked graphene-nucleobase complexes, *Physical Chemistry Chemical Physics* 10 (19), pp. 2722-2729, 2008

9. Schwabe, T., Grimme, S., Theoretical thermodynamics for large molecules: Walking the thin line between accuracy and computational cost, *Accounts of Chemical Research* 41 (4), pp. 569-579, 2008
10. Huenerbein, R., Schirmer, B., Moellmann, J., Grimme, S., Effects of London dispersion on the isomerization reactions of large organic molecules: A density functional benchmark study, *Physical Chemistry Chemical Physics* 12 (26), pp. 6940-6948, 2010

Institutul de Chimie Fizică I.G. Murgulescu (Academia Română)

1. Viorel Chihaiia, Stefan Adams, and Werner F. Kuhs, *Influence of water molecules arrangement on structure and stability of 5^{12} and $5^{12}6^2$ buckyball water clusters. A theoretical study.* **Chemical Physics** **297**, 271-287 (2004)
2. Imre Bakó, Tünde Megyes, Szabolcs Bálint, Tamás Grósz and Viorel Chihaiia, *Water-methanol mixtures: topology of hydrogen bonded network*, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, **10**, 5004-5011 (2008)
3. Soong-Hyuck Suh, Woong-Ki Min, Woo-Chul Kim, Seung-Bak Rho, Won-Sool Ahn, Ki-Ryong Ha, Costinel Lepadatu and Viorel Chihaiia, *The energetic and electronic properties of atomic hydrogen on MgO(001) surface: Tight-binding and Ab initio calculations*, **Korean Journal of Chemical Engineering**, **18**, 512-517
4. Shuhui Cai, Viorel Chihaiia and Karl Sohlberg, *Interactions of methane, ethane and pentane with the (110C) surface of γ -alumina*, **Journal of Molecular Catalysis A: Chemical** **275**, 163-71 9 (2007)
5. V. Chihaiia, A. Ghita, B. -S. Seong and S. -H. Suh, *Theoretical Study of the Adsorbed Small Molecule on Twisted Nanotubes by Atomic Scale Simulations*, **Functionalized Nanoscale Materials, Devices and Systems, NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics**, 2008, II, 449-456

II. RESURSE EXISTENTE

1. Resurse umane si educationale (accent pe dinamica/perspectiva)

Tema 1: Studiul teoretic al structurii atomilor și moleculelor

Subiectul 1.1. Calcule de structura atomica; Spectroscopie teoretică și computațională: metode teoretice de calcul al structurii electronice corespunzătoare stării fundamentale și excitate a atomilor și moleculelor (empirice, semiempirice, Ab Initio (Hartree-Fock, post-HF), DFT, TD-DFT); dezvoltarea de metode cuantice (corelate) și computaționale pentru calculul structurii atomilor și moleculelor; modelare moleculară

Subiectul 1.2. Interacțiuni intermoleculare (hydrogen bonding, vdW, dispersive, potențiale de interacțiune); suprafețe de energie potențială a sistemelor moleculare

Grupuri din tara:

Universitatea Bucuresti,

Universitatea Babes-Bolyai-Cluj

Universitatea Ovidius -Constanta

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei- Magurele

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare- Cluj

1) UB: Catedra de Fizica Atomica, Prof. F. Popescu

2) Groups of prof. T. Beu (6 members) and V. Chiş (6 members) from Babeş-Bolyai university involve researchers, post-docs as well as PhD and Master students.

3) U.O.: Prof Gartu, Oprea C.I., Damian A.

4) INFLPR: Grup Stancalie V.: Stancalie V., Budriga O., Pais V., Mihailescu F A

5) INCDTIM Cluj Napoca group is composed from senior and junior scientists: A. Bende, C. Morari, I. Turcu. Other computational chemistry groups exist in Chemistry departments or Chemistry Research Institutes (F. Cimpoesu, Physical Chemistry Institute, Bucharest).

Number of researchers with interest in theoretical and computational spectroscopy and scientific production at national level is rapidly growing (see Web of Science).

Tema 2. Studiul proprietăţilor atomilor şi moleculelor prin interacţiuni cu câmpul electromagnetic; spectroscopii

Subiectul 2.1. Atomic and molecular spectra, line shapes, widths, and shifts; structura stărilor electronice excited)

Subiectul 2.2. High-resolution/high-sensitivity spectroscopy [Saturation spectroscopy, two-photon spectroscopy, double-resonance spectroscopy (ENDOR, ELDOR, ODMR, etc.)]

Subiectul 2. 3. Metode spectroscopice pentru studiul structurii şi proprietăţilor atomilor şi sistemelor moleculare (UV-Vis, IR, Raman, SERS, RMN, EPR, difracţie de raze X, neutroni sau electroni, microscopie AFM şi STM, Spectroscopie fotoelectronică (UPS, XPS, etc.), Spectroscopie Auger, dicroism circular, CRDS, LIBS, etc).

Grupuri din tara:

1. *Universitatea Bucuresti,*

2. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele*

3. *Institutul National C-D pentru Fizica Materialelor (IFTM)-Magurele*

4. *Universitatea Babes-Bolyai (UBB)-Cluj*

5. *INCDTIM Cluj Napoca*

1. Facultatea de Fizica: Grupul de cercetare Fizica Atomica Teoretica, Prof. Adrian Costescu

Facultatea de Fizica: Prof F Popescu

2. Grup Prof M.L.Pascu : Prof ML Pascu, Dr Staicu Angela, Dr Andrei Ionut, Drd Smarandache Adriana, Drd Boni Mihai, Drd Nastate Viorel Drd Andra Militaru, Dr Pascu Alexandru
3. Grup. Dr Nistor S, Stefan M, Ghica D, Nistor M
4. Grup : Groups of prof. S. Simon, O. Cozar, S. Aștilean from Babeș-Bolyai university involve a large number of researchers, post-docs as well as PhD and Master students.
5. Grup: group is composed from senior and junior scientists: I. Bratu, M. Bogdan, Z. Moldovan, C. Muntean, I. Turcu.

Tema 3. Interacțiunea atomilor și moleculelor cu câmpul laser

Subiectul 3.1. Strong field interactions with atom/molecules

Subiectul 3.2. Interacțiunea atomilor și moleculelor ca câmpul laser (la intensități înalte și intermediare)

Subiectul 3.3. Quantum control with laser pulses, matter wave dynamics, quantum information

Subiectul 3.4. Interactions of atoms with weak electromagnetic fields

Grupuri din țară:

1. *Universitatea București,*
2. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei și Radiației (INFLPR) - Magurele*
3. *Universitatea Babeș-Bolyai -Cluj*
4. *Institutul National C-D pentru Tehnologiile Izotopice și Moleculare –Cluj*
5. *Institutul de Științe Spatiale -Magurele*

1. a) UB: V. Florescu, A Costescu F Popescu, V Bercu, V Baran, S. Spanulescu, C. Stoica, M. Moldovan, C. Popa, M. Dondera, M. Boca, Dinu V, Fîfirig M, P. Marian, T. Marian, I Ghiu,
2. a) INFLPR: : Dr Stancalie V., Dr. Popa A, Dr Budriga O., Drd Pais VF, Drd Mihailescu FA, A Staicu, Andra Militaru, R Cireasa, A Popa
3. a) UBB Prof Ladislau Nagy, 1 asistent, 2 cercetatori postdoc, 1 doctorand
b) Onuc C, Chis V, L David, N. Leopold, S Panzaru, S Simion
4. Tosa V
5. ISS: G Buica, M. Vatasescu

Tema 4. Ciocniri atomice și moleculare

Subiectul 4.1. Ciocniri atomice și moleculare cu particule încărcate rapide (teorie)

Subiectul 4.2. Ciocniri electron-atom și electron-moleculă (experiment)

Subiectul 4.3. Interacțiunea atomilor și a moleculelor cu fascicul de electroni

și

pozitroni – teorie

Grupuri din tara:

1. *Universitatea Bucuresti,*
2. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele*
3. *Universitatea Babes-Bolyai -Cluj*
4. *Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare –Cluj*

1. M Fifirig, M Stroe
2. Prof. Ladislau Nagy, 1 asistent, 2 cercetatori postdoc, 1 doctorand
3. a. Dr. Zaharie Moldovan, C.S. Scmutzer Gabriella, C. S. Veronica Avram, C. S. Florina Tusa, A.C. Olivian Marincas
b. Dr. Alina Magdas, Dr. Cristea Gabriella, C. S. Romulus Puscas
c. Dr. Cezara Voica, C. S. Adriana Dehelean, C. S. Zoltan Balasz

Tema 5. Macromolecule și clusteri

Subiectul 5.1. Macromolecule de interes biologic, polimeri, grafenă: teorie, modelare și simulare; Auto-asamblarea moleculară pentru crearea structurilor multifuncționale complexe; adsorbția moleculelor pe suprafețe metalice și non-metalice; proprietăți la interfața moleculă-substrat

Subiectul 5.2. Calculul Ab initio al structurii, proprietăților termodinamice și spectroscopice ale clusterilor moleculari

Grupuri din tara:

1. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele*
2. *Institutul de Chimie Fizica al Academiei Romane (I G Murgulescu)- Bucuresti*
3. *Universitatea Babes-Bolyai – Cluj*
4. *IFIN-HH Magurele*
5. *ITIM Cluj*

INFLPR: Dinescu M, Barjega M, Dinca Ion, Dinca Valentiba, Papapavlu A, Filipescu M., Scarisoreanu N, Rotaru M, Stokker F,
ICECHIM: V. Chihaiia, A. Ghita, C. Lepadatu
IFIN-HH: M Apostol, C Postolache
ITIM: A Bende, I Grosu, I Turcu

2. Infrastructura de cercetare

Tema 1.

Universitatea Bucuresti,

Universitatea Babes-Bolyai-Cluj

Cluster of 7 HP Z600 workstations × 2 Intel Xeon X5570 2.93 GHz – 56 cores
Cluster of 4 HP xw6600 workstations × 2 Intel Xeon X5450 3.00 GHz – 32 cores
Blade server with 5 blades × 2 Intel Xeon X5430 2.66 GHz – 40 cores
Blade server with 5 blades × 2 Intel Xeon X5410 2.33 GHz – 40 cores
Cluster of 5 PCs Intel Core 2 Quad 2.66 GHz – 20 cores
Fujitsu-Siemens Server for advanced scientific computing: 4 dual core hyperthreading processors (16 cores) Intel Xeon MP & 120M 64 bits, 3.00GHz, 40GB RAM, 538 GB HDD; Software: Gaussian 03W, Gaussian 09 Linux, GaussView, Siesta, CP2K, Windows Enterprise 2003, 64 bits

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei- Magurele

Infrastructura de calcul: 'ATOMIC' Computing resources (Server 2x intel Xeon CPU 3GHz, 4Gb RAM, 2x 140Gb HDD SCSI, Server Intel Pentium 4 CPU 3GHz, 1Gb RAM, 120Gb HDD SATA, Server Intel Celeron CPU 2,8 GHz, 1Gb RAM, 80Gb HDD PATA, Working station x 4 Intel Pentium D CPU 3GHz, 2Gb RAM, 200Gb HDD SATA). The software resources available including IDL, ADAS, CIV3, R-matrix, R-matrix Floquet and Cowan's atomic structure package, are able to produce large amount of data.

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare- Cluj

RO-14 ITIM Site Grid: Processing capacity: 400 cores, storage capacity: 80 TB

Tema 2.

Universitatea Bucuresti,

Facilitatile existente sau accesibile (echipamentele principale)	
Echipamente de cercetare	Laborator de Rezonanta Magnetica, Facultatea de fizica, UB Centrul de cercetare Fizica Atomica si Astrofizica
Agitator magnetic cu incalzire	Agitator magnetic cu incalzire AREX cu termoregulator digital tip VERTEX, Display LCD, Domeniu de termoregulare de la -10°C la + 300°C, precizie ±0.5°C, uzura 0%
Spectrometru REP JEOL	frecventa 9.5 GHz si 24 GHz, Camp magnetic maxim 1.3T, Goniometru, Frecventiometru HP, uzura 80%
Spectrometru REP CMS 8400	frecventa 9.5 GHz, Camp magnetic maxim 0.7T, goniometru, Temperatura variabila: 100÷400K, uzura 0%
Spectrometru RMN	Varian, la 60 MHz, uzura 50%
Acces la infrastructuri prin colaborari internationale	
1. Cea mai importanta colaborare internationala este cu Laboratorul de rezonanta magnetica la campuri si frecvente inalte din cadrul IPCF-Pisa. Obiectivul acestei colaborari consta in accesul la infrastructura existenta in acest laborator. In principal un spectrometru HF-EPR ce lucreaza la 95, 190 si 285 GHz, la campuri magnetice pana la 12 T precum si la temperaturi	

variabile între 4-500 K. Prin intermediul acestui grant va exista o bună oportunitate pentru a dezvolta colaborări cu laboratoarele de rezonanță electronică paramagnetică la câmpuri și frecvențe ridicate din cadrul rețelei SENTINEL, ca de exemplu cu laboratorul HF-EPR de la Universitatea Saint Andrews, UK.

Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei și Radiației (INFLPR) - Magurele

- Sistem de studiu al fluorescenței induse laser pe microparticule cu conținut controlat;
- Sisteme de măsurare a proprietăților fotofizice: generare oxigen singlet, absorbție tranzientă (fotoliza flash);
- Sistem de spectroscopie optoacustică
- Sistem de măsurare prin Laser Induced Break Down Spectroscopy de probe solide
- Sistem de spectroscopie Raman pentru probe lichide, solide;
- Sistem de spectroscopie de absorbție intracavități CRDS.

Universitatea Babeș-Bolyai (UBB)-Cluj

1. Spectrometrul AVANCE 400MHz (9.3 T) UltraShield (Bruker), liquid and solid state phase measurement pentru măsurători pe probe lichide și pe probe solide.
2. Bruker AVANCE 600 MHz (14.1 T), solid state measurements
3. Equinox 55 Bruker FT-IR spectrometer with integrated Raman FRA 106S module +Ramanscope II and ATR (attenuated total reflectance) crystal.
4. Raman DeltaNu 532 and 633 spectrometers;
5. SGC-MS Thermo Quest, Trace DSQ/2000 spectrometer; Gas-chromatograph Agilent 6890, with FID and ECD detectors; UV-VIS Perkin Elmer spectrophotometer
6. Confocal Raman microscope system Alpha 300 R from Witec
7. Atomic Force Microscope system Alpha 300 A from Witec
8. SPECS Multifunctional surface analysis system
9. Atomic Force Microscope (NTEGRA Vita - NT-MDT)
10. JASCO FT-IR-6000 Spectrometer

Tema 3.

Universitatea București,

Resources include: 3 workstations HP XW9300, (Dual AMD Opteron 250, 2.40 GHz, 2GB DDR 400, NVIDIA Quadro, 128 MB), operating system Red Hat Enterprise Linux; 3 workstations Acer ALTOS G5450 (Two dual AMD Opteron DC 2218, 2.6 GHz, 4GB DDRII, NVIDIA Quadro, 128 MB), operating system Red Hat Enterprise Linux; Printer Konica Minolta Bizhub210, Laptop ACER, operating system Windows, video projector.

Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele

Infrastructura de calcul: ‘ATOMIC’ Computing resources (Server 2x intel Xeon CPU 3GHz, 4Gb RAM, 2x 140Gb HDD SCSI, Server Intel Pentium 4 CPU 3GHz, 1Gb RAM, 120Gb HDD SATA, Server Intel Celeron CPU 2,8 GHz, 1Gb RAM, 80Gb HDD PATA, Working station x 4 Intel Pentium D CPU 3GHz, 2Gb RAM, 200Gb HDD SATA). The software resources available including IDL, ADAS, CIV3, R-matrix, R-matrix Floquet and Cowan’s atomic structure package, are able to produce large amount of data.

Infrastructura cercetare experimentală: sisteme laser (durata de puls fs, ps, ns) , sisteme de detectie, sisteme de analiza a rezultatelor.

Universitatea Babes-Bolyai -Cluj

Workstation with 88 cores

Workstation with 28 cores

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare –Cluj

Institutul de Stiinte Spatiale -Magurele

Resources include: PC Intel P4 CPU, 2 GHz, DDR 1GB, Printer Hp Laser jet 1015 , PC Intel P4 CPU, 1.8 GHz , DDR 1GB, PC Intel P4 CPU, 1.8 GHz, DDR 1GB, Printer Hp 3600, scanner HP. Access to online libraries, access to internet connection, access to databases;

Tema 4.

Universitatea Bucuresti,

Facilitatile existente sau accesibile (echipamentele principale)

Echipamente de cercetare

Laborator de Fizica, Facultatea de Chimie, UB

Centrul de cercetare Chimie Fizica Teoretica si Aplicata

3 workstation intel XEON-quad core

Coduri numerice scrise in Fortran

Universitatea Babes-Bolyai –Cluj

Workstation with 88 cores

Workstation with 28 cores

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare –Cluj

Infrastructura Accesibila in INCDTIM:

Sistem Cuplat Cromatograf de Gaze-Spectrometru de Masa de inalta sensibilitate:

-Domeniul de masa: 1-1200 Dalton

- Sursa ionizare: EI, CI;
- Posibilitate de lucru in regim MS/MSⁿ

Spectrometru de Masa pentru Rapoarte Izotopice (IRMS)

Delta V Advantage IRMS, Thermo Finnigan,

- Dual Inlet system
- PreCon for on-line isotopic characterization of CH₄ and N₂O in air at natural concentration and natural isotopic abundances
- Gas Bench II for high precision on-line isotope ratio determination of atmospheric gases (CO₂, O₂/N₂), water, carbonates, DIC
- High Temperature Conversion Elemental Analyzer.

Spectrometru de masa cu plasma cuplata inductiv, ICP-MS

-ICP-MS model DRC-e, Perkin Elmer pentru analize de urme de metale.

Spectrometru de masa de inalta rezolutie

- Domeniul de masa 1-3600 Daltons
- Dubla focalizare (geometrie Nier-Jhonson Inversata, B,E);
- Detectie ioni metastabili;

System cuplat HPLC-MS

- Sistem de ionizare cu electrospray
- Ionizare Chimica

Tema 5.

Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) – Magurele

<p>Laser cu Nd-YAG pulsat Surellite II, ("Continuum", USA)</p>	<p>Armonici: 650 mJ pentru =1064 nm, 350 mJ pentru =532 nm, 160 mJ pentru =355 nm si 100 mJ pentru =266 nm, durata de puls de 5-7 ns, rata de repetitie variabila de 1-10 Hz; Uzura medie 10 %</p>
<p>Laser cu Nd-YAG pulsat Surellite II, ("Continuum", USA)</p>	<p>Armonici: 650 mJ pentru =1064 nm, 350 mJ pentru =532 nm, 160 mJ pentru =355 nm si 100 mJ pentru =266 nm, durata de puls de 5-7 ns, rata de repetitie variabila de 1-10 Hz; Uzura medie 1 %</p>
<p>Laser cu excimeri ArF Microscop de Forta Atomica (AFM) Nomad™ (Quesant) Microscop de Forta Atomica (AFM) XE100 Park</p>	<p>193 nm; Uzura medie 1 % Cu doua moduri de scanare: contact si non-contact; Uzura medie 5 % Cu doua moduri de scanare: contact si non-contact; Uzura medie 1 %</p>
<p>AFM - Cap masura in lichid</p>	<p>Pentru masuratori in mediu lichid, contact si non-contact; Uzura medie 1 %</p>
<p>Difractometru de raze X DRON</p>	<p>Pentru pulberi; Uzura medie 70 %</p>
<p>Difractometru de raze X</p>	<p>Pentru filme subtiri; Uzura medie 1 %</p>

Panalytical Incinta de depunere	Dotata cu sisteme de depunere multitinta si curgere de gaz controlata; Uzura medie 13%
Incinta de depunere MECA 2000	Dotata cu echipament de vid rezistent la coroziune si curgere de gaz controlata; Uzura medie 3%
Incinta de depunere MECA 2000	Dotata cu echipament de vid si curgere de gaz controlata; Uzura medie 1%
Incinta de depunere	Adaptata pentru depuneri de polimeri, proteine, materiale bio, sub forma de filme subtiri prin metoda MAPLE; dotata cu echipament de vid; Uzura medie 3%
Mass flow controler 4 canale	Permite controlul si reglajul presiunii gazului in timpul depunerii; Uzura medie 2%
Mass flow controler 4 canale	Permite controlul si reglajul presiunii gazului in timpul depunerii; Uzura medie 1%
Sistem multi-tinta x 2 buc	Format din 4 suportii pentru tinte; Uzura medie 5%
Suport substrat x 3 buc	Incalzire controlata, in gaz reactiv, pina la 850 °C; Uzura medie 12%
Generator de radiofrecventa si instalatie de descarcare	Cu configuratie de doua incinte, capabila sa genereze fascicul de specii excitate si ionizate; Uzura medie 5%
Analizor punte impedanta	Permite masuratori electrice in intervalul de frecvente 40 Hz - 10 MHz, la temperatura camerei; Uzura medie 2%
Sistem de test feroelectric	Histerezis si curenti de scurgere; Uzura medie 1%
Camera ICCD	Gate 2 ns, 1024x1024 pixeli, 180-850 nm; Uzura medie 1%
Spectroelipsometru	Echipat cu lampa cu Xe care genereaza radiatie in intervalul 250 – 1700 nm; monocromator HS-190; Uzura medie 3%
Microscop cu scanare prin efect de tunel – STM	Scaneaza probe conductoare pe o aria maxima 500 x 500 nm ² ; inaltimea maxima 200 nm; Uzura medie 1%
Sistem spectrometrie de masa a ionilor secundari (SIMS)	Rezolutie in adancime 1 nm, rezolutie laterala sute de nanometri; Uzura medie 0.05%
Surse neinteruptibile (UPS)	Pentru protectia sistemului de spectrometrie de masa a ionilor secundari ; Uzura medie 1%
Sistem de depunere MAPLE	Obtinerea de filme subtiri polimerice si biologice; Uzura medie 0%

Institutul de Chimie Fizica al Academiei Romane (I G Murgulescu)- Bucuresti

Universitatea Babes-Bolyai – Cluj

ITIM Cluj

3. Cooperare interna si internationala

INFLPR:

1. **Membru al FP7: LaserLab2- Network (2008-2011) si LaserLab3(2012-2015).**
2. **FP7: COST ULTRA (2004-2009): LASER-MATTER INTERACTIONS WITH ULTRA-SHORT PULSES, HIGH-FREQUENCY PULSES AND ULTRA-INTENSE PULSES: From Attophysics to Petawatt Physics : Studii asupra interactiunii laser-atom, ion, molecula.**
3. **FP7-ESF-SILMI(2009-2014): Super Intense laser interaction with matter: continuarea studiilor asupra interactiunii electron si foton cu atomi, ioni, molecule**
4. **FP7 – ELI-PP(2007-2010) Extreme light infrastructure – Preparatory Phase**
5. **Colaborari cu**

- a) **Institutul de Fizica Atomica, Gissen, Germania, Prof Alfred Muller :** studiul proceselor colizional electronice, comparare rezultate teoretice /experimentale
- b) **IAEA , Atomic and Molecular Data Division:** obtinere de date atomice si includerea lor in baze de date IAEA
- c) **Auburn University, USA, Prof. Teck Lee:** ciocniri electron-ion , calcul de sectiuni eficace de proces
- d) **Universitatea Paris Sud, Prof A Klisnick:** modelare colizional radiativa
- e) **Facultatea de Fizica Universitatea Bucuresti, Prof V Florescu:** modelare efecte radiative
- f) **Queen’s University of Belfast: Prof P.G.Burke:** calcul date atomice de structura
- g) **GSI- FAIR/SPARC:** atomi in camp intens laser
- h) **Daresbury Labs, U.K.:** calcule R-matrix Floquet, Dr Martin Plummer

UB

1. **FP7: COST ULTRA (2004-2009): LASER-MATTER INTERACTIONS WITH ULTRA-SHORT PULSES, HIGH-FREQUENCY PULSES AND ULTRA-INTENSE PULSES: From Attophysics to Petawatt Physics : Studii asupra interactiunii laser-atom, ion, molecula.**
2. **FP7-ESF-SILMI(2009-2014): Super Intense laser interaction with matter: continuarea studiilor asupra interactiunii electron si foton cu atomi, ioni, molecule**
3. **Colaborari :** FOM Olanda, Harvard University USA, INFLPR
4. Laboratorul de rezonanta magnetica la campuri si frecvente inalte din cadrul IPCF-Pisa. Obiectivul acestei colaborari consta in accesul la infrastructura existenta in acest laborator. In principal un spectrometru HF-EPR ce lucreaza la 95, 190 si 285 GHz, la campuri magnetice pana la 12 T precum si la temperaturi variabile intre 4-500 K. Prin intermediul acestui grant va exista o buna oportunitate pentru a dezvolta colaborari cu laboratoarele de rezonanta electronica paramagnetica la campuri si frecvente ridicate din cadrul retelei SENTINEL, ca de exemplu cu laboratorul HF-EPR de la Universitatea Saint Andrews, UK.
5. Colaborari internationale importante: una cu grupul de fizica teoretica de la Universitatea Montpellier II, condus de profesorul S. Ciulli, iar cealalta cu grupul de la

Oxford Brooks University, condus de profesorul M. Pidcock. Colaborarea cu ambele grupuri se face, prin acorduri semnate de domnii rectori ai celor 3 universitati, in domeniul electrodinamicii cuantice si a fenomenelor de transport si de radiatie in plasma de fuziune.

6. Universitatea din Firenze

7. Colaborare stransa cu grupul d-lui Nistor (INCDFM) desfasurata mai ales in cadrul unor granturi de cercetare in parteneriat: ref.[9,10]

UBB

1. **COST CUSPFEL action (2008-2012) - Chemistry with Ultrashort Pulses and Free-Electron Lasers: Looking for Control Strategies Through "Exact" Computations – Tema 3.2, impreunna cu Universitatea din Bucuresti (V. Florescu)**
2. **Institute of Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, Debrecen, Hungary – Temele 3.2 si 4.1**
3. **York University, Canada – Tema 4.3**
4. **Bergen University, Norway – Tema 4.1**
5. **Western Michigan University, Kalamazoo, USA – Tema 4.1**

IV. POTENTIAL APLICATIV SI IMPACT ECONOMIC

Tema 1: Studiul teoretic al structurii atomilor și moleculelor

Subiectul 1.1. Calcule de structura atomica. Spectroscopie teoretică și computațională: metode teoretice de calcul al structurii electronice corespunzătoare stării fundamentale și excitate a atomilor și moleculelor (empirice, semiempirice, Ab Initio (Hartree-Fock, post-HF), DFT, TD-DFT); dezvoltarea de metode cuantice (corelate) și computaționale pentru calculul structurii atomilor și moleculelor; modelare moleculară

Subiectul 1.3. Interacțiuni intermoleculare (hydrogen bonding, vdW, dispersive, potențiale de interacțiune); suprafețe de energie potențială a sistemelor moleculare

Participanti:

Universitatea Bucuresti,

Universitatea Babes-Bolyai-Cluj

Universitatea Ovidius -Constanta

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei- Magurele

Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare- Cluj

Studiul teoretic al structurii atomilor și moleculelor contribuie la înțelegerea fizicii implicată în interacțiunea materiei cu pulsuri laser foarte scurte și intense, la dezvoltarea de noi cunoștințe legate de fizica materialelor, și a fenomenelor legate de științele vieții și ale mediului înconjurător. Ne așteptăm ca rezultatele obținute în cadrul obiectivelor propuse pe Tema 1 să formeze baza unor generații următoare de experimente, și de colaborare cu mari infrastructuri de fizică experimentală.

Determinarea cu acuratețe a nivelelor de energie, a probabilităților de tranziție radiativă, și a altor proprietăți intrinseci ale atomilor și moleculelor este un studiu fundamental. Aceste date atomice, stocate în baze de date la nivel de atom, ion sau moleculă, sunt de interes în toate domeniile vieții. Sunt studiate și utilizate în explicarea fenomenelor fizice. Metodele folosite și implementate de grupurile din țară sunt cele mai performante metode utilizate la nivel de domeniu. Rezultatele deja obținute de aceste grupuri sunt recunoscute prin publicarea lor în reviste științifice cotate ISI. Experiența cercetătorilor români implicați în această activitate este garanția atingerii obiectivelor propuse.

Spectroscopia teoretică și computațională este dificil de abordat fără un suport tehnic și computațional modern care să permită rularea de coduri de structură de dimensiuni mari. Acuratețea rezultatelor depinde de performanța sistemelor de calcul existente. Colaborarea internațională și națională a grupurilor care sunt implicate în acest domeniu al fizicii atomice permite utilizarea supercomputerelor localizate în regiuni diferite ale Europei.

Activitățile de cercetare fundamentală legate de această tematică sunt corelate la cele mai importante programe științifice ale momentului: Infrastructura de dezvoltare a laserilor intensi ELI-NP, infrastructura de dezvoltare a accelerării de particule FAIR prin subprogramul de fizică atomică SPARC, și ITER. Spectroscopia atomică și moleculară își aduce aportul la diagnosticarea fenomenelor fundamentale în natură. Rezultate cantitative: energii de nivel atomic și molecular, timpi de viață radiativi, secțiuni eficace de proces, transfer de populații între stări atomice, abundența diferitelor stadii de ionizare; profit stipulat: publicații științifice (bibliometrie), atragerea de studenți în domeniul fizicii atomice; profit estimat: rezultatele vor fi publicate în reviste de prestigiu, vor fi prezentate la workshopuri și conferințe internaționale în domeniu, seminarii

Tema 2. Studiul proprietăților atomilor și moleculelor prin interacțiuni cu câmpul electromagnetic; spectroscopii

Subiectul 2.1. High-resolution/high-sensitivity spectroscopy [Saturation spectroscopy, two-photon spectroscopy, double-resonance spectroscopy (ENDOR, ELDOR, ODMR, etc.)]

Subiectul 2.2. Metode spectroscopice pentru studiul structurii și proprietăților atomilor și sistemelor moleculare (UV-Vis, IR, Raman, SERS, RMN, EPR, difracție de raze X, neutroni sau electroni, microscopie AFM și STM, Spectroscopie fotoelectronică (UPS, XPS, etc.), Spectroscopie Auger, dicroism circular, CRDS, LIBS, etc).

Participanți:

Universitatea București,

Universitatea Babeș-Bolyai-Cluj

Institutul Național C-D pentru Fizica Materialelor-Magurele

Institutul National C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei- Magurele
Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare- Cluj

Studiile efectuate in cadrul acestei teme sunt cu preponderenta experimentale, si se bazeaza pe o infrastruktura performanta. Metodele spectroscopiei experimentala in fizica atomica sunt cele mai dificil de implementat. Existenta unor astfel de facilitati in tara permite obtinerea de informatii deosebit de importante in stiintele vietii si ale mediului. Activitatea consta in implementare si dezvoltarea de metode spectroscopice pentru studiul unor hidrocarburi poliaromatice in jet supersonic, pentru studiul prin spectroscopie de absorbtie, fluorescenta, fosforescenta, Raman, FTIR, optoacustica, a unor molecule de interes biomedical si studiul spectral privind fotostabilitatea unor medicamente nou sintetizate isi gaseste aplicatie directa si cu un impact economic deosebit.

Determinarea structurii sistemelor complexe moleculare, caracterizarea raspunsului lor la agenti externi (camp electromagnetic), elucidarea mecanismelor care guverneaza adsorbtia moleculara pe suprafete metalice si ne-metalice, au impact direct asupra cunoasterii proceselor biologice folosind metode spectroscopice.

Grupurile din tara care isi aduc aportul la ceasta tematica sunt in colaborare stiintifica cu grupuri importante din strainatate. Beneficiul direct al acestor activitati consta tocmai in impactul economic pe care il au: dezvoltarea si implementarea de noi componente biologice capabile sa inlocuiasca (in calitate de implant) zone afectate din corpul uman. Spectroscopia de absorbtie, optoacustica a unor molecule se foloseste de mult timp in studiul cancerului.

Obiectivele propuse de grupurile din tara vor fi indeplinite avand in vedere expertiza stiintifica a cercetatorilor. Rezultatele vor fi publicate in reviste stiintifice in domeniu. Se va avea in vedere cresterea comunitatii stiintifice romanaesti prin atragerea de tineri care sa efectueze lucrari de licenta si doctorate in aceste domeniu.

Romania este candidata pentru gazduirea uneia dintre cele mai mari infrastrukturi Europene, ELI-NP. Aceasta infrastruktura va pune la dispozitie tinerilor cercetatori cele mai performante instrumente cu care pot studia sistemele macromoleculare de interes biologic.

Tema 3. Interactiunea atomilor si moleculelor cu câmpul laser

Subiectul 3.1. Strong field interactions with atom/molecules

Subiectul 3.2. Interactiunea atomilor si moleculelor ca campul laser (la intensitati inalte si intermediare)

Subiectul 3.3. Quantum control with laser pulses, matter wave dynamics, quantum information

Subiectul 3.4. Interactions of atoms with weak electromagnetic fields

Grupuri din tara:

1. *Universitatea Bucuresti,*
2. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele*

3. *Universitatea Babes-Bolyai -Cluj*
4. *Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare –Cluj*
5. *Institutul de Stiinte Spatiale -Magurele*

Cercetarea interactiunii sistemelor atomice si moleculare cu campuri electromagnetice (laser) reprezinta activitatea cea mai bogata din punctul de vedere al numarului de cercetatori implicati, si in consecinta al rezultatelor obtinute si publicate. Dezvoltarea acestor cercetari se face in stransa colaborare cu grupuri importante din lume, in cadrul celor mai renumite programe stiintifice internationale. Expertiza acestor grupuri de cercetare a avut ca efect intrarea Romaniei in competitie pentru gazduirea ELI. Fizica fenomenelor extreme este un domeniu coontemporan al cercetarii, si implica diferite arii ale stiintei fundamentale si aplicate. Dezvoltarea rapida a tehnologiilor laser, a ingineriei tintelor, si a metodelor spectroscopiei cu rezolutie spatiala si temporala face posibil implementarea de noi experimente in scopul intelegerii materiei foarte dense. Sistemele laser care genereaza pulsuri mai scurte decat 10fs (10^{-15} s) la intensitati relativiste sunt deja utilizate in lume. Romania este conectata prin programe Europene: LaserLab, ELI, FAIR la aceste marfi infrastructuri.

Participarea cercetatorilor romani in cercetarea fizicii atomilor si moleculelor in camp de radiatie coerenta va aduce cu sine dezvoltarea de: noi surse laser, noi materiale, noi metode teoretice si experimentale, cunostinte noi. Numarul mare de publicatii pe aceasta tematica este o garantie pentru indeplinirea obiectivelor propuse.

Ne asteptam la dezvoltarea de noi cunostinte privind starile atomice modificate laser, utilizarea radiatiei X-UV in biologie, controlul cuantic si transmiterea de informatie la distanta prin utilizarea proprietatilor atomilor aflati in camp laser, transfer de populatie atomica intre stari Rydberg foarte inalte, si fuziunea confinata inertial.

Este bine cunoscut faptul ca numai prin cunoasterea proceselor de interactiune laser-atom, laser-plasma se pot aduce noi rezultate privind terapia cu protoni, accelerarea de particule intr-un timp mult mai scurt si la energii mult mai mari decat cele atinse de marile acceleratoare din lume.

Tema 4. Ciocniri atomice și moleculare

Subiectul 4.1. Ciocniri atomice si moleculare cu particule incarcate rapide (teorie)

Subiectul 4.2. Ciocniri electron-atom si electron-molecula (experiment)

Subiectul 4.3. Interactiunea atomilor si a moleculelor cu fascicul de electroni si

pozitroni – teorie

Grupuri din tara:

1. *Universitatea Bucuresti,*
2. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei si Radiatiei (INFLPR) - Magurele*
3. *Universitatea Babes-Bolyai -Cluj*
4. *Institutul National C-D pentru Tehnologii Izotopice si Moleculare –Cluj*

În contextul dezvoltării de noi modele teoretice și metode numerice pentru studiul interacțiunii atomilor și moleculelor cu particule încărcate rapide, al interacțiunii atomilor și moleculelor cu fascicule de electroni și pozitroni, noi sisteme experimentale de explorare sunt necesare. Profitul estimat al acestor preocupări stă în publicarea rezultatelor în reviste internaționale de prestigiu, în participarea la cooperări internaționale și atragerea de tineri studenți pentru dezvoltarea de cercetări în domeniu.

Studiul interacțiunilor particulelor încărcate (protoni, electroni, pozitroni, antiprotoni) cu molecule este extrem de importantă din punctul de vedere al aplicațiilor medicale (PET, radioterapie etc.)

Tema 5. Macromolecule și clusteri

Subiectul 5.1. Macromolecule de interes biologic, polimeri, grafenă: teorie, modelare și simulare; Auto-asamblarea moleculară pentru crearea structurilor multifuncționale complexe; adsorbția moleculelor pe suprafețe metalice și non-metalice; proprietăți la interfața moleculă-substrat

Subiectul 5.2. Calculul Ab initio al structurii, proprietăților termodinamice și spectroscopice ale clusterilor moleculari

Grupuri din țară:

1. *Institutul National de C-D pentru Fizica Laserilor, Plasmei și Radiației (INFLPR) - Magurele*
2. *Institutul de Chimie Fizică al Academiei Române (I G Murgulescu)- București*
3. *Universitatea Babeș-Bolyai – Cluj*
4. *IFIN-HH Magurele*
5. *ITIM Cluj*

Dezvoltarea acestei tematici în INFLPR se bazează pe o infrastructură deosebită și un număr impresionant de cercetători tineri. Ei au dezvoltat colaborări internaționale cu laboratoare importante și activează în proiecte NATO sau Europene. Principalul beneficiu al acestor cercetări îl constituie dezvoltarea de echipe mixte de cercetare capabile să studieze proprietățile moleculelor, crearea de structuri macromoleculare și multifuncționale complexe, și a proprietăților termodinamice și spectroscopice ale clusterilor moleculari. Publicarea în reviste de prestigiu, includerea grupurilor de cercetare românești în rețele internaționale și participarea la proiecte internaționale aduce un câștig în ridicarea prestigiului cercetării în acest domeniu.

V. ANALIZA SWOT

Puncte tari:

- Existenta in Romania a unei comunitati de cercetare (seniori, posdocs, doctoranzi) capabila sa obtina rezultate de nivel international in fizica atomica si moleculara, teoretica si experimentală;
- Existenta unor colaborari internationale in cadrul programelor Europene (COST, ESF, FP7) si Internationale (IAEA, EURATOM) permite obtinerea de rezultate performante. Numarul mare de publicatii in jurnale recunoscute: Phys Rev A, J Phys B., J. Chem Phys etc. reprezinta garantia de dezvoltare a domeniului;
- Existenta unor infrastructuri de calcul performante a determinat obtinerea de rezultate teoretice de inalt nivel stiintific, acceptate si publicate in reviste de prestigiu;
- existența unei infrastructuri de cercetare de înalt nivel în domeniul spectroscopiei moleculare;
- Dezvoltarea in Romania a unor infrastructuri de performanta (Supercomputer, Extreme Light Infrastructure(ELI), Centrul Integral pentru Tehnologii Avansate cu Laser (CETAL)) va aduce dupa sine cresterea numarului de proiecte in domeniul fizicii atomice si moleculare experimentale;
- Organizarea in Romania a unor conferinte internationale de prestigiu in domeniu.

Puncte slabe:

- Nu exista o politica coerenta in programul de pregatire al studentilor in domeniul fizicii atomice si moleculare;
- Nu exista o infrastructura experimentală de performanta in fizica atomica fapt pentru care nu exista rezultate experimentale pentru masuratori de sectiuni eficace, timpi de viata etc.
- slabă colaborare inter-grupuri din Romania – nu se încurajează suficient prin mijloace financiare aceste colaborări;
- infrastructură de cercetare fragmentată și insuficient exploatată;
- acces limitat la documentare (reviste științifice și baze de date).

Oportunități

- participare in programe de cooperare internationala, in proiecte de infrastructuri mari (ELI, ITER, CERN etc.);
- colaborarea strânsă cu grupuri de cercetare din domenii conexe (chimie, biologie, medicina, știința materialelor).

Amenințari

- izolarea grupurilor și abordarea unor subiecte de cercetare punctuale de interes limitat;
- pierderea resursei umane datorită dificultăților economice si din cauza emigrării;
- slaba finantare a activitatii educationale in domeniul fizicii atomice, moleculare si chimice va avea ca efect slaba pregatire a studentilor si reducerea substantiala a capitalului performant existent in domeniu.

VI. OBIECTIVE SI PRIORITATI STRATEGICE PE TERMEN SCURT (2012-2014) SI MEDIU(2015-2020)

Pe termen scurt (2012-2014)

- Intensificarea *colaborarii nationale* prin proiecte de cercetare comune universitati-institute concentrate pe identificarea catorva directii de dezvoltare a domeniului simultan cu cresterea performantei
- Realizarea de *infrastructura experimentală* in fizica atomica cu finantare din proiecte nationale sau internationale
- Intensificarea *colaborarilor intenationale*
- Cresterea vizibilitatii, *pe plan national*, a cercetarilor de fizica atomica, moleculara si chimica, prin organizarea de sesiuni de lucru comune, workshops
- Cresterea vizibilitatii *pe plan international* prin publicatii in reviste de prestigiu

Obiective stiintifice/tematice:

1. Studii de structura atomica, moleculara si chimica in sprijinul programelor europene si internationale de astrofizica, astronomie, fizica particulelor accelerate, fizica plasmelor de fuziune cu confinare inertiala sau magnetica; Progamele noastre includ cercetari pentru noile facilitati nationale si internationale . Activitati concrete: obtinerea de date de structura pentru: a) elemente din grupa Fierului (de interes pentru astrofizica),b) carbon neutru (de interes in fuziune ICF si MCF-ITER), calcule de chimie cuantica pentru molecule complexe (de interes in bio si nanostructuri), calcule de interactiuni intermoleculare, obtinere de potentiale intermoleculare cu aplicatii in fizica fundamentala a moleculelor.
2. Dezvoltarea de metode experimentale, spectroscopice, pentru studii la scara atomica a defectelor induse in materiale nano-structurate. Studiul structurii proprietatilor moleculelor de interes biomedical. Determinari prin spectrometrie de masa ai compusilor de mediu.
3. Dezvoltarea de modele teoretice si metode numerice dedicate interactiunii laserilor intensi si de durata de puls foarte scurta cu atomi, molecule si clusteri. Activitati concrete: a) generarea de armonici de ordin superior, b) generare de radiatii X-UV, c) generare de radiatii gamma via efect Compton invers, d) dinamica moleculara, e) gaze atomice ultra reci, f) controlul cuantic al proceselor atomice si moleculare cu pulsuri laser, si g) procesarea informatiei

cuantice . Avem in vedere: studiul interactiei radiatiei laser intensa cu atomi cu 2 electroni in afara unei paturi complete, studiul asocierii a doi atomi reci in camp intens laser, studiul efectului Compton direct si invers, studiul generarii de armonice superioare la interactiunea radiatiei laser intensa cu atomi de hidrogen, modificarea starilor cuantice in prezenta radiatiei laser intensa, generarea de electroni si accelerarea in camp intens de radiatie, interactiuni electromagnetice intre memorii atomice si moleculare.

4. Studiul ciocnirilor atomilor si moleculelor cu particule incarcate rapide in sprijinul programelor de astrofizica, fuziune termonucleara, si de cercetare fundamentala . Avem in vedere urmatoarele activitati: a) descrierea fenomenelor de coerenta si decoerenta care apar in spectrele energetice ale electronilor ejectati in urma ionizarii moleculelor de hidrogen; b) simularea experimentelor cinematic complete-dinamica electroni; c) studiul interactiunii pozitronului cu molecule de interes medical; d) aplicarea ciocnirilor electron-atom in spectrometria de masa.
5. Investigarea mecanismelor de transfer a polimerilor si compusilor biologici (de ex. proteine si lipzomi) si corelarea proprietatilor acestor materiale (functionalitate) cu conditiile experimentale; extinderea procedurilor de obtinere elaborate la alte materiale polimerice (pentru aplicatii in senzoriala), compusi biologici; Obținerea și folosirea informațiilor detaliate legate de structura electronică a clusterilor moleculari pentru înțelegerea proprietăților materialelor catalitice, Dezvoltarea de tehnici experimentale avansate pentru investigarea comportamentului fizico-chimic al sistemelor moleculare complexe în condiții extreme

Pe termen mediu (2015-2020)

- Consolidarea grupurilor de cercetare existente in institute si universitati prin finantarea de centre de cercetare in domeniul fizicii atomice, moleculare si chimice; aceste centre vor facilita studentilor doctoranzi participarea la cercetari institutionale, apropiate de infrastructurile gazduite de aceste institute.
- Finantarea cercetarii romanesti si sprijinirea dezvoltarii de facilitati (de calcul-supercomputere, grid; experimentale) pentru a face posibila imbunatatirea cantitativa si calitativa a resursei umane

Obiective stiintifice/tematice

1. Utilizarea infrastructurii de calcul existenta la nivel national (HPSC) pentru a permite simularea proceselor fundamentale atomice , moleculare si chimice care se produc in afara, si in prezenta campului laser intens. Ne propunem in prima

etapa dezvoltarea unei „virtual research communities support” care sa faciliteze calcule stiintifice de inalta performanta

2. Obținerea de date de structura atomica, moleculara si chimica pentru atomi, molecule, ioni atomici si moleculari. Avem in vedere dezvoltarea de modele teoretice si simulari numerice pentru : descrierea distributiei energetice a electronilor rapizi obtinuti in urma interactiunii laser-plasma, obtinerea de sectiuni eficace de ciocnire electron atom, ion atomic si molecular obtinerea de sectiuni eficace de fotoionizare, si de ionizare peste prag, efect Compton, bremsstrahlung invers. Un interes deosebit il reprezinta studiul interactiunilor intermoleculare, asocierea de atomi reci si controlul cuantic al strarilor inalte.
3. Dezvoltarea cercetarii in domeniul interactiunii atomilor si moleculelor cu particule incarcate rapide si din punct de vedere experimental.

VII. RECOMANDARI

- Imbunatatirea sistemului de acces la informatie (jurnale, baze de date, etc).
- Cresterea rolului Societatii Romane de Fizica/ Sectiunea de Fizica Atomica si Moleculara in intensificarea colaborarii nationale si a vizibilitatii comunitatii stiintifice nationale. Societatea Romana de Fizica prin Sectiunea de Fizica Atomica are rolul de a aduce impreuna grupurile de cercetare din tara, in sesiuni de comunicari stiintifice sau prin implicarea directa, nemijlocita in gazduirea conferintelor internationale, a workshopurilor , pe domeniul fizicii atomice, moleculare si chimice. In acest moment aceste activitati sunt sprijinite de institutii, separat, in functie de domeniul de activitate. Tematica de fizica atomica si moleculara dezvoltata cu succes in tara se regaseste dispersata pe mai multe site-uri web, a diferitelor congrese sau conferinte. SRF /Sectiunea de fizica atomica trebuie sa aiba un site actualizat care sa cuprinda grupuri, tematica, proiecte, si evident sa ofere granturi studentilor care sunt interesati in acest domeniu. Vedem deasemenea necesar implicarea Sectiunii de Fizica Atomica, prin Societatea Romana de Fizica in finantarea unor programe de fizica, la inceput de mai mica dimensiune bugetara, dar dedicate cercetarii in fizica atomica (ceea ce face la nivel European, ESF).
- Avem in vedere sustinerea unei noi scheme de finantare a granturilor studentesti, atat pe perioada studiilor universitare, cat si pe perioada de doctorat. Aceasta schema trebuie permita studentilor accesul la facilitatile de calcul ale institutiilor, accesul la codurile performante si la cercetarea reala in domeniul fizicii atomice.
- Dezvoltarea sistemului educational in fizica atomica, moleculara, chimica.