

UNIVERSITATEA BABEȘ-BOLYAI DIN CLUJ-NAPOCA

**Theoretical and Computational Physics
Applied in Complex Systems Studies**

**Fizica teoretică și computațională aplicată
în studiul sistemelor complexe**

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

Candidat: Conf. univ. dr. Ferenc Járαι-Szabó

**Cluj-Napoca
2026**

Introducere

Această teză de abilitare prezintă o sinteză a rezultatelor științifice obținute în perioada postdoctorală, concentrându-se pe aplicarea fizicii computaționale și a modelării teoretice pentru elucidarea comportamentului sistemelor complexe la scări de lungime și energie fundamental diferite. De la interacțiunile subatomice care guvernează procesele de ionizare, până la dinamica macroscopică a plăcilor tectonice sau a traficului rutier, sistemele fizice prezintă adesea comportamente neliniare, stocastice sau emergente ce nu pot fi descrise prin soluții analitice simple. În acest context, metodele computaționale servesc drept o punte indispensabilă între teoria fundamentală și realitatea experimentală.

Lucrarea este structurată în trei direcții majore de cercetare, unite metodologic prin utilizarea simulărilor numerice avansate: *Sisteme atomice*, *Sisteme de tip bloc-resort* și *Partiționare spațială (diagrame Voronoi)*. Traseul descris în lucrare urmărește o evoluție de la modele cuantice deterministe și semiclasice, către dinamici stocastice, culminând cu elemente de geometrie statistică și topologia rețelelor complexe.

1. Sisteme atomice și coerența proiectilului

Prima parte a tezei abordează descrierea teoretică a coliziunilor atomice și moleculare, un domeniu esențial pentru înțelegerea corelațiilor electron-electron și a coerenței stărilor cuantice în interacțiunile cu puține corpuri. Pentru a descrie secțiunile eficace complet diferențiale (FDCS) obținute în experimente cinematice complete de tip COLTRIMS, a fost utilizată o abordare hibridă bazată pe aproximarea semiclastică (SCA) și teoria perturbatiilor de ordinul întâi și doi.

În studiul ionizării și excitării simultane a sistemelor multielectronice, litiul a servit drept prototip fundamental. Studiile au demonstrat că formarea ionilor de litiu cu vacanță dublă în pătura K nu poate fi explicată în limitele modelelor de particule independente, procesul fiind guvernat în întregime de corelațiile electronice. Folosind funcții de undă de tip Multiconfiguration Hartree-Fock pentru a prinde corelațiile statice și dinamice din stările inițiale și finale, a fost identificată competiția dintre mecanismele de prim ordin (“shake-off” și “shake-up”) și mecanismele de ordinul doi (interacția secvențială a proiectilului cu doi electroni). Pentru stările cu simetrie S domină mecanismele de prim ordin, în timp ce pentru stările P mecanismul de ordinul doi aduce o contribuție comparabilă.

O direcție distinctă a vizat interferența cu două centre în sistemele moleculare. Deși în ionizarea moleculelor simple precum H_2 s-au observat interferențe de tip Young datorate emisiei coerente de pe cele două centre atomice identice, în cazul moleculelor mai complexe precum N_2 bombardate cu ioni rapizi H^+ (1-5 MeV), s-a constatat suprimarea

interferențelor primare. Această suprimare se datorează prezenței orbitalilor cu parități mixte ale căror contribuții de interferență se anulează reciproc. Prin normalizarea secțiunilor eficace moleculare experimentale la secțiunile atomice teoretice s-au pus în evidență însă structuri oscilatorii de înaltă frecvență independente de unghiul de observare sau de viteza de coliziune. Calculele teoretice confirmă că aceste structuri secundare apar ca urmare a împrăștierei intramoleculare, unde un electron emis dintr-un centru este împrăștiat pe nucleul vecin.

În cele din urmă, am adresat limitările aproximării traiectoriei clasice în obținerea secțiunilor eficace complet diferențiale. Determinarea parametrului de impact corespunzător unui anumit transfer de impuls a fost realizată rezolvând o problemă de împrăștiere clasică în potențialul ecranat, folosind balanța momentului transversal. Cu toate acestea, anomalii majore din planul perpendicular pe transferul de impuls observate la ionizarea heliului cu ioni grei (C^{6+}) au putut fi rezolvate complet doar prin introducerea conceptului de coerență a proiectilului. Prin descrierea proiectilului masiv nu ca o undă plană coerentă, ci ca un pachet de unde cu o lățime transversală finită (lungime de coerență mică), interferențele distructive din planul perpendicular sunt suprimate, reproducând structurile observate experimental.

2. Comportament emergent în sisteme de tip bloc-resort

A doua secțiune extinde modelarea către scările mezoscopică și macroscopică, demonstrând versatilitatea fenomenologică a modelelor de tip bloc-resort, bazate pe paradigma clasică Burridge-Knopoff. Aceste modele captează competiția dintre acumularea elastică a energiei potențiale (faza “stick”) și disiparea bruscă prin constrângeri de frecare (faza “slip”), reprezentând un cadru optim pentru studiul criticității auto-organizate (SOC) și al formării de structuri.

Sistemul a fost adaptat cu succes pentru a modela fenomene de trafic rutier pe o singură bandă, spărgând simetria acțiunii și reacțiunii. Elementul central de noutate a fost implementarea unei frecări stocastice pentru a reprezenta imperfecțiunile, inerția comportamentală și timpii variați de reacție ai șoferilor. S-a arătat că tranziția de la fluxul liber la fluxul congestionat (“ambuteiaje fantomă”) este o tranziție de fază de ordinul doi indusă de dezordine. Prin extinderea la trafic pe două benzi, s-a revelat un comportament de tip “minority game”: strategia de schimbare agresivă a benzii (lane-changing) este avantajoasă doar dacă este adoptată de o minoritate, conducând la degradarea globală a fluxului dacă devine majoritară.

În știința materialelor, modelul 2D bloc-resort a fost extins pentru a explica

propagarea fisurilor și selecția modelelor de rupere în sticlă amorfă supusă șocurilor punctiforme. Dezordinea structurală a sticlei este simulată prin praguri aleatoare de frecare și forțe de rupere a arcurilor, rezultând o dinamică de relaxare supramortizată. Modelul a reprodus simultan crăpăturile radiale și arcele concentrice, confirmând legea de scalare empirică liniară dintre energia impactului și numărul fisurilor radiale.

La nivel nanometric, auto-organizarea indusă de forțe capilare a fost studiată în cazul cristalizării suspensiilor de nanosfere de polistiren și al alinierii pădurilor de nanotuburi de carbon. Interacțiunea complexă dintre capilaritate și repulsia electrostatică a fost cartografiată pe arcuri elasto-plastice. Simulările explică nucleerea golurilor și colapsul structurii sub tensiune către rețele celulare stabile, demonstrând că distribuția ariilor celulelor urmează o lege exponențială (distribuție de maximă entropie). Suplimentar, s-a validat ipoteza că o forță externă oscilantă (prin sonificare) elimină defectele și rețelele metastabile pătrate, conducând la formarea de structuri perfect ordonate în rețea triunghiulară, vitale pentru nanolitografie.

Secțiunea include de asemenea studii comparative în seismologie. Utilizând date experimentale privind disiparea energiei în trei zone seismice (Vrancea, Japonia, California de Sud) și emisii acustice ale micro-cutremurelor rezultate din alunecarea planurilor cristalografice în metale (monocristale de Zinc), am demonstrat o analogie statistică profundă: ambele fenomene urmează o distribuție universală de tip Tsallis-Pareto, cu un exponent de scalare invariant. Mai mult, prin aplicarea formalismului analitic stocastic de creștere locală și resetare globală (LGGR - Local Growth Global Reset) cu salturi incomplete, am oferit fundamentul teoretic analitic al legii Gutenberg-Richter. S-a investigat și apariția comportamentului haotic și a intermitențelor pe un sistem 1D bloc-resort pe o bandă rulantă (conveyor belt), demonstrând tranziții de fază induse de zgomot dinamic care fac tranziția de la mișcări periodice la haos permanent.

3. Partiționare spațială și diagrame Voronoi

Ultima secțiune explorează metode de geometrie stocastică și topologia rețelelor complexe, având la bază diagramele Voronoi. Pentru diagramele Poisson Voronoi (PVD) continue, am derivat formule analitice compacte și cu număr redus de parametri care aproximează foarte precis distribuția dimensiunilor celulelor în spațiile de interes practic (2D și 3D). Simulările Monte Carlo la scară extrem de mare (zeci de milioane de celule) validează un profil de tip $f(y) \propto y^{(3d-1)/2} \exp(-(3d+1)y/2)$, independent de densitatea centrelor de generare. În plus, dinamica de creștere spațială continuă pe latice 1D, modelată folosind formalismul Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (KJMA) cu nucleere continuă, a fost elucidată teoretic printr-o abordare de tip “câmp mediu” (mean-field), prezicând o formă de distribuție Weibull pentru dimensiunile finale ale celulelor.

Conceptele de partiționare au fost extinse de la mediul continuu către identificarea modularității rețelelor complexe (community detection). Prin transformarea topologiei grafurilor într-un spațiu metric, unde distanța dintre noduri este definită pe baza inversului coeficientului de clustering (Edge Clustering Coefficient), am putut construi celule Voronoi direct pe structura de graf. Determinarea centrelor de nucleere a fost rezolvată inițial determinist (căutând maximele locale de densitate relativă). Ulterior s-a optat pentru o teselare stocastică: selectând aleator un set de noduri generatoare și construind un ansamblu statistic de partiționări, a putut fi calculată o “coeziune Voronoi” reprezentând probabilitatea ca două noduri să pice în aceeași celulă. Această metodă s-a dovedit a fi extrem de eficientă computațional ($O(N \log N)$) și a produs performanțe superioare altor algoritmi uzuali pe rețele benchmark sau pe rețele empirice (cum ar fi rețeaua neuronală C. elegans sau rețelele sociale).

Concluzii

Rezultatele reunite în această teză subliniază forța și adaptabilitatea paradigmelor de fizică computațională. Prin integrarea metodelor semiclasice pentru difuzia atomică, scalarea fenomenologică a modelelor de tip bloc-resort pentru sisteme departe de echilibru și utilizarea partiționărilor de tip Voronoi în studiul grafurilor, se demonstrează că principiile fizicii statistice și neliniare oferă explicații coerente și unificate pentru structuri la nivel atomic, fenomene la nivel nano- și micrometric, precum și pentru organizarea sistemelor complexe sociale sau geofizice.