



UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
Facultatea de Fizică
ȘCOALA DOCTORALĂ DE FIZICĂ



Leonard Constantin GEBAC

SISTEME SUPRAMOLECULARE FORMATE DIN ATOMI
ÎNCORPORAȚI ÎN STRUCTURI ÎNCHISE

REZUMATUL TEZEI DE DOCTORAT

Conducător Științific
Prof. dr. Valeriu FILIP

București, 2024



UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
Facultatea de Fizică
ȘCOALA DOCTORALĂ DE FIZICĂ



Leonard Constantin GEBAC

SISTEME SUPRAMOLECULARE FORMATE DIN ATOMI
ÎNCORPORAȚI ÎN STRUCTURI ÎNCHISE

REZUMATUL TEZEI DE DOCTORAT

Președintele comisiei

Prof. dr. Alexandru JIPA - Universitatea din București

Conducător Științific

Prof. dr. Valeriu FILIP - Universitatea din București

Scientific committee

Prof. Dr. rer. nat. Marian ENĂCHESCU - UNSTPB

Conf. Dr. Mircea BERCU - Universitatea din București

CS I Dr. Titus SANDU - IMT București

București, Iulie 2024

Mulțumiri

Înainte de toate, doresc să îmi exprim recunoștința față de Dumnezeu, Marele Arhitect al Universului, ce a făcut posibilă această realizare. Familia mea, care m-a susținut necondiționat, merită mulțumiri deosebite. Tatălui meu îi sunt recunoscător pentru blândețea și subtilitatea cu care m-a încurajat să studiez și să iubesc Fizica. Sunt profund recunoscător soției mele, Alexandra, și copiilor noștri, Ema, Teo și Isa, pentru dragostea și sprijinul lor neconținut, precum și pentru credința lor în mine.

Aș vrea să aduc mulțumiri speciale profesorilor mei coordonatori. Domnului profesor Valeriu Filip îi sunt dator pentru îndrumarea și sprijinul oferit în realizarea acestei teze de doctorat. De asemenea, îi mulțumesc domnului profesor Mircea Bercu pentru nenumăratele discuții purtate de-a lungul anilor și pentru îndrumarea sa în cadrul lucrărilor de Licență, disertație și Doctorat. Un gând de recunoștință aparte îi adresez domnului profesor Vasile Bercu pentru toate discuțiile motivaționale și pentru leadership-ul său exemplar. Fără contribuția sa, această teză nu ar fi fost posibilă. Mai mulțumesc tuturor profesorilor Facultății de Fizică care au contribuit la formarea mea ca fizician, le rămân îndatorat și acestora.

Mulțumirile mele se îndreaptă și către studenții alături de care am colaborat în acești ani de studii doctorale. Ca îndrumător al lucrărilor lor de Licență, am avut plăcerea să lucrez cu Alina Munteanu, Claudia Jerca, Alex Niculescu, Mihaela Cosinschi, Sorin Brătescu, Ionuț Slabu, Ștefan Mateică, Richard Radu, Izabela Gîjgă, Andrei Aldini și Monica Mirea. Le mulțumesc pentru colaborarea lor și pentru contribuțiile valoroase aduse în cadrul acestor proiecte.

Cuprins

1	Introducere	1
2	Teorie și Metode	3
2.1	Structură electronică	3
2.1.1	Ecuția Schrödinger	3
2.1.2	Aproximația Born-Oppenheimer	3
2.1.3	Teoria Hartree-Fock	4
2.2	Dinamică Moleculară	5
2.3	Metodologie	5
3	Cazul He@C₂₀H₂₀	7
3.1	Încapsulare	7
3.2	Încapsulare + câmp electric	8
3.3	Evoluția în timp	11
4	Cazul Ne@C₂₀H₂₀	13
5	Cazul H₆@C₂₀H₂₀	16
6	Concluzii	19
7	Lista contribuțiilor proprii	22
7.1	Lucrări publicate în reviste	22
7.1.1	Reviste cotate ISI	22
7.2	Lucrări în curs de publicare	22
7.2.1	Reviste cotate ISI	22
7.3	Lucrări prezentate la conferințe	22
7.3.1	Conferințe internaționale	22
7.3.2	Conferințe naționale	22
7.4	Lucrări de Licență Îndrumate	23

Introducere

Această teză de doctorat explorează proprietăți ale cuștilor moleculare care încapsulează diferiți atomi, de forma $X@C_{20}H_{20}$. Scopul este de a obține o înțelegere profundă a mecanismelor de încapsulare și a dinamicii post-încapsulare, având în vedere aplicațiile potențiale ale acestor sisteme în diverse domenii științifice și tehnologice. Mai mult decât atât, sunt studiate fenomene de încapsulare și evoluție temporală în care sunt aplicate diverse câmpuri electrice staționare. În plus, este realizat și un studiu demonstrativ în care este oferită perspectiva unei noi aplicații, nu numai a acestor cuști moleculare de dodecahedron, dar și a altor cuști sau sisteme moleculare închise sau semi-închise.

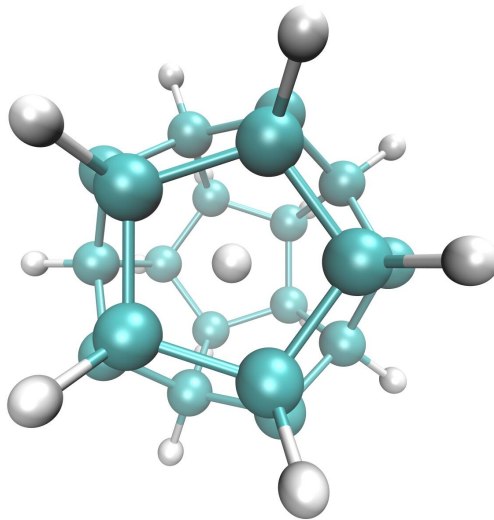


Figura 1.1: $He@C_{20}H_{20}$

Teza este structurată în șase capitole. Primul capitol oferă o introducere generală în domeniul studiat, în timp ce al doilea capitol descrie metodele utilizate în simulări și procesul de analiză. În al treilea capitol, este investigată încapsularea unui atom de heliu (He) în dodecahedronul $C_{20}H_{20}$. Simulările realizate cu software-ul GAMESS au explorat mecanismele și dinamica acestei reacții. A fost determinat intervalul de energii cinetice inițiale pentru care are loc capturarea fără decapsulare, a fost examinat efectul aplicării unui câmp electric static asupra procesului de încapsulare și a fost analizată comportarea pe termen lung a noului sistem endohedral format. Rezultatele au oferit o înțelegere detaliată a procesului de încapsulare a heliului în $C_{20}H_{20}$ și evoluția acestuia sub influența câmpurilor electrice externe sau în absența acestora.

Al patrulea capitol se concentrează pe simulările de dinamică moleculară ab initio pentru a

investiga coliziunea între un atom de neon și cușca moleculară $C_{20}H_{20}$. Studiul a identificat patru posibile rezultate în funcție de viteza inițială a neonului, variind de la reflexie și distrugerea cuștii până la încapsulare și ejecție. În cazul încapsulării, simularea de 4.8 ps a arătat stabilitatea frecvenței de oscilație a neonului și evoluția sistemului către o stabilitate crescută. Frecvența principală de oscilație de 16 THz sugerează aplicații în nanoelectronică, similare cu oscilatorul atomic pe bază de heliu.

În al cincilea capitol, au fost realizate simulări de dinamică moleculară ab initio pentru a explora o aplicație inovatoare a dodecahedronului $C_{20}H_{20}$, analizând comportamentul sistemului $H_6@C_{20}H_{20}$. Studiul a evidențiat schimbările structurale și dinamice ale atomilor de hidrogen în timpul compresiei cuștii, subliniind creșterea presiunii până la valori de ordinul sutelor de GPa și variabilitatea temperaturii între 70 și 4700 K. Simulările au arătat fazele termodinamice accesate de sistemul H_6 pe un diagramă T-P extinsă, deschizând perspective în obținerea hidrogenului metallic, un superconductor la temperatura ambientală.

Studiile prezentate în această teză evidențiază potențialele aplicații ale cuștilor moleculare în diverse domenii, de la nanoelectronică la obținerea materialelor cu proprietăți exotice la presiuni și temperaturi extreme. Concluziile sugerează că aceste sisteme pot oferi soluții inovatoare la provocările tehnologice moderne și deschid noi direcții de cercetare în știința materialelor și fizica aplicată.

Teorie și Metode

În acest capitol se introduc conceptele fundamentale legate de teoria și metodele de calcul de structură electronică [1–3], dinamică moleculară [4], coduri de calcul utilizate [5] și metode de analiză a rezultatelor [6, 7].

2.1 Structură electronică

2.1.1 Ecuația Schrödinger

Ecuația Schrödinger este un concept fundamental în fizica cuantică și este utilizată pentru a descrie comportamentul sistemelor cuantice, inclusiv molecule. Forma independentă de timp a ecuației Schrödinger este dată de:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

unde \hat{H} este operatorul Hamiltonian care reprezintă energia totală a sistemului, Ψ este funcția de undă, iar E este valoarea proprie a energiei.

Operatorul Hamiltonian \hat{H} include contribuții din energia cinetică a nucleelor și electronilor, precum și din energia potențială datorată interacțiunilor dintre acestea:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \nabla_N^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_N \sum_{M>N} \frac{Z_N Z_M e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{NM}} \\ & - \sum_N \sum_i \frac{Z_N e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{iN}} + \sum_j \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

unde N și M desemnează nucleele, i și j desemnează electronii, Z_N și Z_M sunt sarcinile nucleare, m_N și m_e sunt masele nucleelor și ale electronilor, respectiv, iar r_{NM} , r_{iN} și r_{ij} sunt distanțele dintre particule.

2.1.2 Aproximația Born-Oppenheimer

Considerând forma hamiltonianului, 2.2, ecuația Schrödinger 2.1 nu poate fi rezolvată analitic cu excepția cazului atomului hidrogenoid. Din acest motiv, pentru rezolvarea acestei ecuații, sunt utilizate metode numerice și aproximații simplificatoare. Una dintre aceste aproximații este cunoscută sub numele de aproximația Born-Oppenheimer, care ia în considerare diferența de masă între nucleee și electroni. Deoarece masele nucleelor sunt mult mai mari decât masa electronilor ($m_N \gg m_e$), electronii pot avea o mișcare mult mai rapidă decât nucleele. Prin urmare, într-o aproximare rezonabilă, nucleele pot fi considerate fixate în timp

ce electronii își desfășoară mișcarea. Din perspectiva clasică, într-un interval de timp în care electronul completează un ciclu, schimbările în configurația nucleelor pot fi neglijabile. Astfel, considerând nucleele fixate, se omit termenii energiei cinetice nucleare din hamiltonianul 2.2 pentru a obține ecuația Schrödinger corespunzătoare mișcării electronului

2.1.3 Teoria Hartree-Fock

Teoria Hartree-Fock reprezintă una dintre cele mai importante metode aproximative de a rezolva ecuația Schrödinger electronică, definită sub forma următoare:

$$\hat{H}_e \Psi_{el} = E_e \Psi_{el} \quad (2.3)$$

Metoda iterativă constă în următorul algoritm: se începe cu un set de funcții de undă de încercare ce alcătuiesc baza pentru orbitalii moleculari. Cu ajutorul acestui set inițial de orbitali moleculari se calculează operatorul Fock \hat{F} :

$$\hat{F}(1) = \hat{H}^{core}(1) + \sum_j^{N_e} [\hat{J}_j(1) - \hat{K}_j(1)] \quad (2.4)$$

$$\hat{H}^{core}(1) = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \sum_N \frac{Z_N}{r_{1N}} \quad (2.5)$$

unde operatorul coulombian \hat{J}_j și operatorul de schimb \hat{K}_j se definesc prin efectul pe care îl au:

$$\begin{aligned} \hat{J}_j(1) |\phi_j(1)\rangle &= \langle \phi_j(2) | \frac{1}{r_{12}} | \phi_j(2)\rangle |\phi_j(1)\rangle \\ \hat{K}_j(1) |\phi_j(1)\rangle &= \langle \phi_j(2) | \frac{1}{r_{12}} | \phi_j(2)\rangle |\phi_j(1)\rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

Se calculează elementele de matrice:

$$F_{rs} \equiv \langle \chi_r | \hat{F} | \chi_s \rangle, \quad S_{rs} \equiv \langle \chi_r | \chi_s \rangle \quad (2.7)$$

Apoi ecuația seculară:

$$\det(F_{rs} - \varepsilon_i S_{rs}) = 0 \quad (2.8)$$

Aceasta se rezolvă pentru a se obține un set inițial de energii orbitale ε_i . Aceste ε_i se introduc în relația:

$$\sum_{s=1}^b c_{si} (F_{rs} - \varepsilon_i S_{rs}) = 0, \quad r = 1, 2, \dots, b \quad (2.9)$$

Astfel se obține un set îmbunătățit de coeficienți c_{si} , adică un set îmbunătățit de orbitali moleculari ϕ_i , ce sunt la rândul lor utilizați în calculul operatorului Fock \hat{F} îmbunătățit.

Această procedură se repetă până când coeficienții orbitalilor moleculari, respectiv energiile orbitale nu se mai modifică de la o iterație la alta.

Metoda Hartree-Fock de calcul al energiei unei molecule are o mare valoare istorică. Este o metodă *ab-initio* (toate calculele sunt făcute complet, *de la început*, fără introducerea de valori empirice) ce a fost utilizată cu succes în calculul și în predicția multor proprietăți atomice și moleculare. Aceasta stă la baza calculelor utilizate în studiile întreprinse în cadrul perioadei de doctorat, calcule prezentate în secțiunile următoare.

2.2 Dinamică Moleculară

Metodele de dinamică moleculară generează o secvență de coordonate în spațiul fazelor ce sunt corelate temporar (o traiectorie) propagând un set de coordonate și viteze inițiale în concordanță cu legea a doua a lui Newton, $\vec{F}_N = m_N \vec{a}_N$. Pentru un set de atomi ce se află în interacțiune, \vec{F}_N reprezintă forța resimțită de unul dintre ei, m_N este masa acelui atom, iar \vec{a}_N este accelerația imprimată atomului respectiv. În formă diferențială, legea a doua a dinamicii se exprimă în felul următor:

$$-\nabla_N V(q_N) = m \ddot{q}_N \quad (2.10)$$

Indicii N au fost folosiți pentru a indica faptul că prin dinamica atomilor se înțelege dinamica nucleelor atomice. Nucleele sunt considerate puncte materiale înzestrate cu masă, iar acestora le este atribuită noțiunea de traiectorie. Această aproximație este foarte bună în anumite condiții, având în vedere masa mare a nucleelor. Relieful de energie potențială în care nucleele se află este dat, pe de o parte, de distribuția nucleelor în spațiu, iar pe de altă parte, de distribuția electronilor. Nucleele se mișcă clasic, în câmpul potențial generat de electroni. Acesta este termenul $V(q_N)$, energie potențială de interacțiune inter-atomică. Modul în care este calculat acest termen împarte metodele de dinamică moleculară în două categorii: dinamică moleculară clasică și non-clasică. Dinamica moleculară clasică este cea în care potențialul de interacțiune este predefinit, bazat pe rezultate empirice ori pe rezultate ale calculelor de structură electronică independente. Dinamica moleculară non-clasică, denumită în general, dinamică moleculară *ab-initio* [4], are la bază ideea de a calcula forțele ce acționează asupra nucleelor cu ajutorul metodelor de calcul de structură electronică pe parcursul dezvoltării traiectoriei de dinamică moleculară. Așa cum a fost menționat anterior, diferența de masă dintre nuclee și electroni permite decuplarea dinamicii celor doi, aceasta fiind aproximația Born-Oppenheimer, menționată înainte. Dacă metoda de calcul a energiei electronice E_{el} este cea descrisă anterior, și din această expresie a energiei se calculează forțele, atunci simulările poartă numele de simulări de dinamică moleculară Born-Oppenheimer (BOMD - "Born-Oppenheimer Molecular Dynamics").

2.3 Metodologie

Toate calculele efectuate în cadrul studiilor ce formează domeniul de cercetare al acestei teze de doctorat sunt bazate pe teoria și metodele descrise în secțiunile anterioare. Procesele fizice ce au fost observate și analizate constau în studiul interacțiunii dintre un atom sau un sistem molecular mic și molecula cușcă $C_{20}H_{20}$. Tratarea sistemelor de interes a fost realizată la nivel teoretic, simulările fiind efectuate cu ajutorul pachetului de coduri de calcul de structură

electronică numit GAMESS [5]. Accentul a fost pus pe analiza dinamică (evoluție temporală) a sistemelor studiate. Din acest punct de vedere, au fost studiate procese de ciocnire ce au avut ca scop încapsularea unui atom în dodecahedran, efectul aplicării câmpurilor electrice de diferite intensități și pe diferite direcții asupra încapsulării și stabilității ulterioare a sistemului nou format, precum și interacțiunea dintre fullerană (gazdă) și alte sisteme atomice sechestrate. În fiecare dintre aceste situații, sistemul complet, cel ce conține toți atomii, a fost analizat ca interacțiune dintre subsisteme. Pentru că simulările de dinamică moleculară efectuate sunt caracterizate de ansamblul statistic microcanonic, energia totală se conservă. Astfel, au putut fi urmărite interacțiunile dintre subsisteme (atom - cușcă sau sistem de atomi - cușcă) și transferul de energie dintre acestea. Conservarea energiei totale se exprimă matematic în următoarea formă:

$$K_{X-C}(t) + Q_{X-C}(t) = \text{const.} \quad (2.11)$$

Cu K s-a notat energia cinetică totală, iar cu Q energia potențială totală. X și C se referă la subsistemele ce alcătuiesc sistemul complet, C pentru cușcă și X pentru atomul/atomii ce nu fac parte din cușcă. Corelând cu simulările de dinamică moleculară și având în vedere dependența de timp a acestor mărimi, relația 2.11 se poate rescrie:

$$K_X[0] + K_C[0] + Q_{X-C}[0] = K_X[i] + K_C[i] + Q_{X-C}[i] \quad (2.12)$$

Unde pasul de timp este pus între paranteze pătrate. Termenul K_{X-C} a fost exprimat ca suma energiilor cinetice ale subsistemelor. "[0]" se referă la momentul de timp inițial. Pentru a avea o referință a energiei potențiale, se scade din ambii membri termenul $Q_{X-C}[0]$, iar diferența se notează cu $V_{X-C}[i]$. Astfel se va obține:

$$K_X[0] + K_C[0] = K_X[i] + K_C[i] + V_{X-C}[i] \quad (2.13)$$

Toate aceste mărimi fizice au fost monitorizate pe parcursul simulărilor de dinamică moleculară. Studiul acestora a dus la caracterizarea detaliată a procesului de încapsulare al unui atom în $C_{20}H_{20}$, precum și la evoluția sistemului în timp. A putut fi identificat pragul energetic de la care încapsularea poate avea loc, și mai mult, mecanismele prin care aceasta se petrece. Evoluția sistemului către o stabilitate mai mare a fost pusă în evidență prin studiul transferului de energie de la atom la cușcă și prin distribuția energiei cinetice inițiale a atomului incident în translația, rotația, vibrația și deformarea cuștii moleculare.

Cazul He@C₂₀H₂₀

Acest capitol descrie în detaliu procesul de încapsulare al unui atom de He în dodecahedranul C₂₀H₂₀. Studiul este efectuat la nivel teoretic, din perspectiva calculelor statice și a simulărilor de dinamică moleculară, prin metoda descrisă în teza de doctorat, în capitolul 2. Astfel, au fost simulate ciocniri, cu parametru de impact 0, dintre atomul de He, pe post de proiectil, și ținta, dodecahedranul C₂₀H₂₀, aflat inițial în repaus.

3.1 Încapsulare

În prima secțiune, este descris în detaliu, din perspectiva simulărilor de dinamică moleculară, procesul de ciocnire cu simetria cea mai înaltă, dintre un atom de heliu ce a fost lansat cu energii cinetice inițiale situate în intervalul 14-28 eV și o cușcă moleculară de dodecahedran, aflată în repaus, la echilibru. S-a observat importanța utilizării simulărilor de dinamică moleculară în acest tip de calcule. Rezultatele ce au reieșit din aceste simulări sunt în bună concordanță cu rezultate experimentale. Mai mult decât atât, răspunsul dinamic al atomilor ce formează cușca poate fi surprins numai prin simulări de dinamică, nu și prin calcule statice.

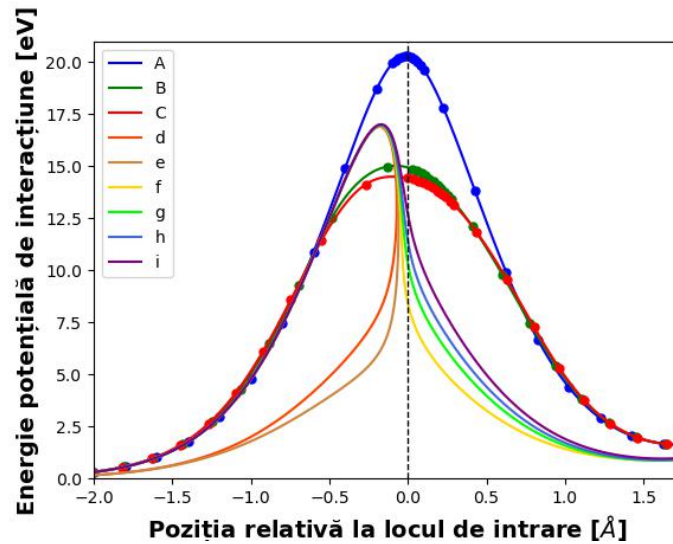


Figura 3.1: Barierele de energie potențială statică și dinamice. A, B și C - statice. d, e, f, g, h, i - potențiale dinamice de interacțiune, corespunzătoare vitezelor: d - $v = 315 \text{ \AA/ps}$, e - $v = 315.3125 \text{ \AA/ps}$, f - $v = 315.625 \text{ \AA/ps}$, g - $v = 315.9375 \text{ \AA/ps}$, h - $v = 316.25 \text{ \AA/ps}$, i - $v = 316.875 \text{ \AA/ps}$. Linia punctată corespunde poziției centrului pentagonului. Pozițiile negative corespund exteriorului cuștii, iar cele pozitive interiorului.

Ca exemplu, în figura 3.1 se observă diferențe mari între energia potențială de interacțiune He–C₂₀H₂₀ statică, respectiv, dinamică. În plus, din perspectiva mecanismului de captură, parametrii geometrici oferă imaginea deschiderii pentagonului țintit la apropierea proiectilului, compresia locală a cuștii, urmată de extensia acesteia, simultan cu încapsularea atomului incident.

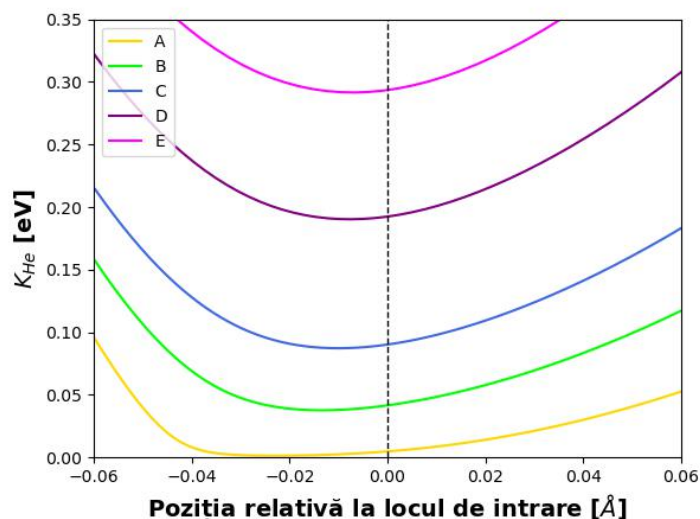


Figura 3.2: Energia cinetică a atomului de heliu. Mărire pe zona asociată încapsulării. Vitezele corespunzătoare sunt: A - 315.625; B - 315.9375; C - 316.25; D - 316.875; E - 317.5 toate în Å/ps. Linia discontinuă verticală este asociată punctului de penetrare.

Din punctul de vedere al parametrilor energetici, se observă un transfer de energie, care este maxim pentru energia de prag. Un alt aspect foarte important surprins în simulări, este accelerarea atomului incident înainte ca acesta să pătrundă în spațiul interior cuștii, ambele afirmații fiind observabile în figura 3.2. Toate aceste observații duc la o înțelegere mai profundă a fenomenului de captură asociat ciocnirii simetrice dintre atomul de He și dodecahedranul C₂₀H₂₀, ducând în final la probabilități mai mari de sechestrare a heliului în dodecahedran față de cele raportate până în prezent[8].

3.2 Încapsulare + câmp electric

În următoarea secțiune sunt prezentate mecanismele de formare ale sistemului endohedral He@C₂₀H₂₀ în prezența unui câmp electric uniform, de diferite intensități aplicat pe două direcții: paralel, respectiv, antiparalel cu direcția de lansare a atomului incident. Acesta este lansat perpendicular și central pe o față pentagonală, la fel ca în cazul anterior descris. Spre deosebire de acesta, este aleasă o singură viteză, anume, viteza de prag (315.625 Å/ps), pentru toate simulările.

Calculul este realizat în două aproximații, tot prin metoda Hartree-Fock: prima aproximație este la fel ca în secțiunea anterioară, anume UHF, setul de bază 6-31G, iar a doua aproximație utilizează tot UHF cu setul de bază 6-31G*. Diferența constă în adăugarea unor orbitali suplimentari în setul de încercare, corespunzători unui moment cinetic orbital l cu o unitate

	Câmp electric	Energie cinetică Helium	Energie de vibrație a cuștii	Energie de deformare a cuștii	Energie potențială de interacțiune	Energie de translație	Distanță vecini I – vecini II	Raza inel de intrare	Distanță legătură CH
6-31G	↓	↑	↓	↓	↑	↓	↓	↓	↑
Potrivire		✓				✓	✓		✓
6-31G*	↓	↑	↑	↑	↓	↓	↓	↑	↑

Figura 3.4: Concluziile preliminare. Săgeata orientată în sus semnifică o creștere a mărimii respective, iar săgeata în jos o scădere. Potrivirea se referă la tendința similară în ambele aproximații utilizate

Energia potențială de interacțiune este cu atât mai mare cu cât și câmpul este mai intens, iar din punct de vedere geometric, deformarea se manifestă prin micșorarea distanței dintre vecinii de ordinul I și II și creșterea legăturii CH. În același timp raza inelului de intrare este mai mică. Tot în această aproximație, se pot corela anumite mărimi: energia de vibrație, energia de deformare, raza inelului de intrare și potențialul de interacțiune. Este de așteptat ca, dacă raza este mai mică, energia potențială de interacțiune să fie mai mare, de asemenea, o rază mai mică a ciclopentanului sugerează o deformare mai mică, în acest fel justificând-se și dependența energiei de vibrație a cuștii și cea de deformare. Cu toate acestea, deformarea, respectiv, vibrația cuștii nu sunt date doar de modificarea razei inelului pentagonal, ci și din compresia locală (distanță vecini I - II) și legătura CH, aceste mărimi, în aproximația 6-31G, nefiind corelate cu celelalte.

Pentru cazul 6-31G*, în momentul încapsulării, cu cât câmpul electric aplicat pe direcție paralelă cu traiectoria heliului este mai intens, cu atât energia cinetică a atomului incident este mai mare, iar acesta transferă mai multă energie cuștii sub formă de vibrație și deformare și mai puțină sub formă de translație. Energia potențială de interacțiune scade, iar din punct de vedere geometric, compresia este mai accentuată, raza inelului mai mare și lungimea legăturii CH mai mare. În această situație, mai mulți parametri sunt corelați decât în 6-31G: se poate observa că, o raza a inelului mai mare, împreună cu o lungime a legăturii CH tot mai mare și o distanță vecini I - II mai mică, parametrii geometrice ce toți sugerează o deformare mai mare, într-adevăr duc la o deformare a cuștii mai mare, acest lucru regăsindu-se în valori ale energiei de vibrație și deformare mai mari. De asemenea, o raza mai mare sugerează un potențial de interacțiune mai mic (ca urmare a creșterii razei, distanțele de la atomii de carbon la heliul incident cresc), fapt ce se observă în coloana 6.

Se poate observa o concordanță între cele două metode doar în ceea ce privește energia cinetică a heliului, energia de translație a cuștii, distanța dintre vecinii de ordinul I și II și lungimea legăturii CH. Astfel, se poate afirma cu un grad de certitudine ridicată, că efectul principal pe care îl are aplicarea unor câmpuri electrice este acela de a facilita procesul de încapsulare al unui atom de heliu în interiorul dodecahedranului, dacă direcția de aplicare a câmpului este

paralelă cu direcția de lansare a atomului. Bilanțul energetic depinde de aproximația utilizată, însă, având în vedere complexitatea superioară a setului 6-31G* față de 6-31G, precum și corelația dintre mai mulți parametri monitorizați, conduc la concluzia că aproximația 6-31G* este cea care descrie cu mai mare acuratețe acest proces.

3.3 Evoluția în timp

În următoarea secțiune este descrisă evoluția sistemului He@C₂₀H₂₀ post captură, într-un interval de timp de 5 ps de la încapsulare. Aproximația utilizată este 6-31G și este justificată considerând avantajul raportului acuratețe-timp computațional. Pentru aceeași viteză inițială de lansare a atomului de heliu, anume, 355 Å/ps, pe aceeași direcție și în aceleași condiții descrise în secțiunile anterioare, sistemul a fost lăsat să evolueze liber timp de 1 ps. Apoi, în intervalul 1-5 ps, au fost considerate două situații: prima, în care sistemul își continuă evoluția, iar cea de-a doua, în care în acel interval de timp este aplicat un câmp electric exterior, uniform, pe direcție perpendiculară pe direcția lansării cu intensitatea de 0.01 unități atomice (câmpul electric este aplicat paralel cu axa Ox). Diferențele dintre cele două situații

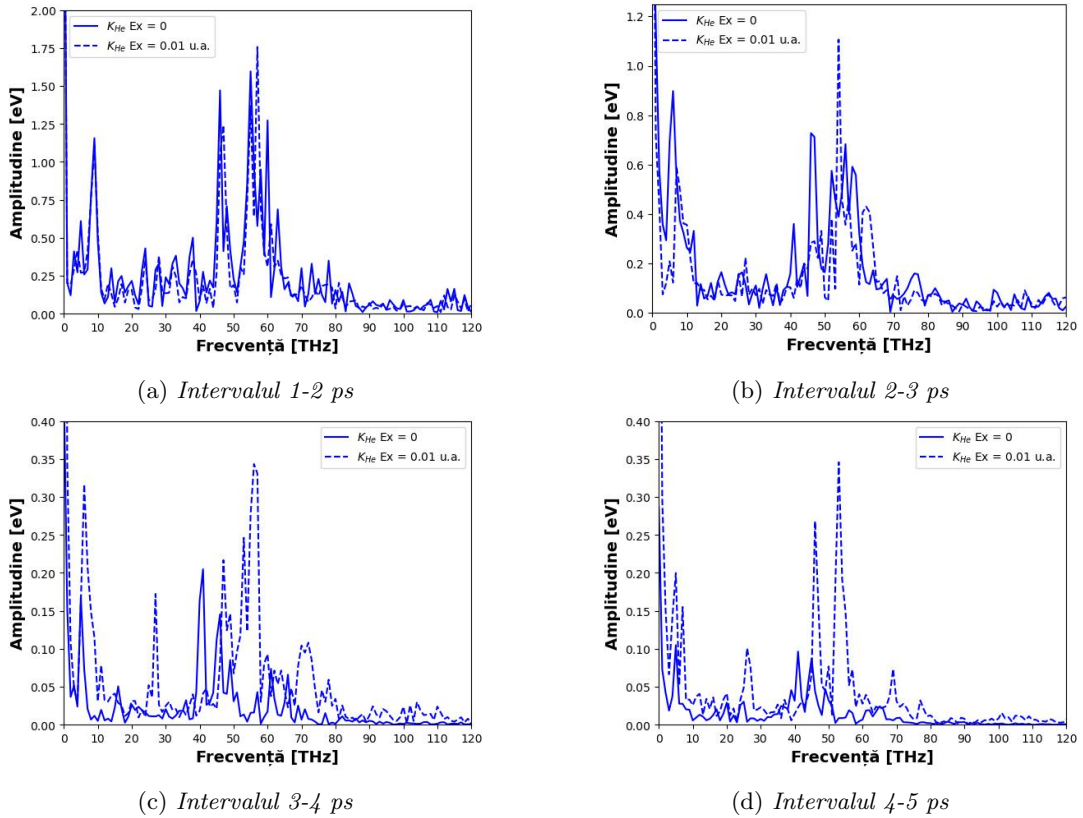


Figura 3.5: Frecvențele de oscilație ale energiei cinetice a heliului. Linia continuă reprezintă frecvențele în absența câmpului, iar cu linie discontinuă sunt reprezentate frecvențele în prezența câmpului.

sunt analizate în această secțiune, din perspectiva unor parametri geometrici, energetici și din perspectiva evoluției dipolului electric. Așa cum s-a arătat în prima secțiune a acestui capitol, intervalul de viteze în care încapsularea are loc este între 315.625 și 355 Å/ps. Pentru vitezele inițiale din acest interval, sistemul este stabil o anumită perioadă de timp. Pentru

a se putea observa și analiza stabilitatea sistemului în timp, viteza pragului superior a fost aleasă (355 Å/ps). La o viteză inițială mai mare a atomului de He, procesele de transfer de energie se desfășoară mai rapid, iar în aceste condiții, se poate studia stabilitatea sistemului într-un interval de timp mai scurt. Concluzia cea mai importantă ce reiese din acest studiu este că sistemul evoluează către o stare de stabilitate crescută, această concluzie reieșind din analiza amplitudinilor frecvențelor cu care are loc transferul de energie între molecula gazdă și atomul încapsulat.

Intervalul temporal de 1-5 ps a fost împărțit în 4 subintervale egale (1-2, 2-3, 3-4 și 4-5 ps) și pe fiecare subinterval au fost analizați parametrii anterior menționați, astfel încât să fie analizată evoluția acestora în timp. S-a observat că sistemul evoluează către o stare de stabilitate crescută, concluzie bazată pe scăderea amplitudinilor frecvențelor ce caracterizează oscilația atomului în interior și energia de vibrația a cuștii.

Din perspectiva deformării dodecahedranului, se poate spune că sistemul și-a păstrat starea de stabilitate. Câmpul electric are efect asupra oscilației heliului în interior, impunându-i o frecvență de oscilație dominantă diferită de cea a evoluției fără câmp aplicat. Acest lucru se observă și în evoluția energiei de translație a cuștii, ce manifestă aceeași frecvență ca oscilația pe direcția Oz a heliului. Analiza energiei cinetice a heliului arată cum frecvențele scad în amplitudine, ceea ce semnifică un transfer de energie He-C₂₀H₂₀ ce se reduce în timp, așa cum se poate observa în figura 3.5. Acest lucru confirmă ipoteza evoluției către stabilitate și este o explicație pentru care sistemul He@C₂₀H₂₀ este stabil în timp, din punct de vedere experimental, timp de săptămâni [8].

Cazul Ne@C₂₀H₂₀

În acest capitol este descrisă ciocnirea centrală dintre un atom de neon și molecula de tip cușcă, dodecahedranul C₂₀H₂₀, din perspectiva simulărilor de dinamică moleculară, de tip ab-initio Hartree-Fock. Scopul principal al acestei investigații este înțelegerea comportamentului partenerilor de reacție și a consecințelor potențiale ale acestei interacțiuni. Sunt descoperite patru scenarii diferite ale interacțiunii, iar accentul cade cel mai mult pe un canal de reacție care presupune încapsularea atomului incident în interiorul cuștii moleculare. Analiza detaliată a ratei de schimb de energie între atomul de neon și molecula C₂₀H₂₀, frecvențele de oscilație mecanică ale atomului și cuștii, precum și frecvența cu care se modifică momentul de dipol electric, oferă o înțelegere profundă a dinamicii acestui sistem endohedral. Rezultatele indică faptul că neonul devine un oscilator atomic stabil în interiorul cuștii moleculare, fapt ce are implicații importante în domeniul nanotehnologiilor și al nanosenzorilor.

De asemenea, sunt prezentate formarea și evoluția în timp a sistemului Ne@C₂₀H₂₀. Încapsularea este tratată prin simularea ciocnirii cu cea mai înaltă simetrie (prin centrul unui inel pentagonal), între un atom de neon și cușca de dodecahedran. Accentul este pus pe evoluția în timp a sistemului endohedral. Astfel, sunt descrise și calculate transferul de energie și frecvențele de oscilație ale atomului Ne și ale cuștii. Deoarece detaliile încapsulării atomului Ne în C₂₀H₂₀ și evoluția în timp a întregului sistem sunt dincolo de posibilitățile experimentale, este adoptată abordarea dinamicii moleculare, care este cea mai bună metodă, în general, pentru înțelegerea caracteristicilor de bază ale unui proces de încapsulare și a evoluției post-captură [10, 11].

Cușca C₂₀H₂₀ are un volum de 28,75 Å³, mai mic decât alte cuști de tip fullerene, precum C₆₀, cu un volum de 163,03 Å³ [12]. Acest lucru sugerează o cuplare mai bună între atomul de gaz nobil inclus și cușca de dodecahedran. Bazat pe acest studiu, este sugerată și o posibilă cauză pentru absența raportărilor experimentale ale încapsulării atomului de neon în interiorul C₂₀H₂₀.

Astfel, au fost efectuate simulări de dinamică moleculară ab initio pentru a studia coliziunea cu simetria cea mai înaltă dintre un atom de neon și o cușcă moleculară de dodecahedran C₂₀H₂₀. Prin calcularea barierei statice pe care proiectilul ar trebui să o depășească pentru a penetra în interiorul C₂₀H₂₀, a fost estimată energia necesară pentru încapsulare. Au fost identificate patru rezultate diferite posibile în ceea ce privește interacțiunea dintre atomul incident și fullerană, în funcție de viteza inițială a neonului, reprezentate în figura 4.1. Sub 205 Å/ps, neonul se reflectă de pe primul pentagon întâlnit; între 205 și 227.5 Å/ps, respingerea înapoi se face de pe fața pentagonală opusă intrării, combinată cu distrugerea cuștii; între 227.5 și 280 Å/ps este intervalul în care încapsularea este posibilă; peste 280 Å/ps, proiectilul intră și apoi iese din cușcă prin ciclopentanul opus. Pentru al treilea

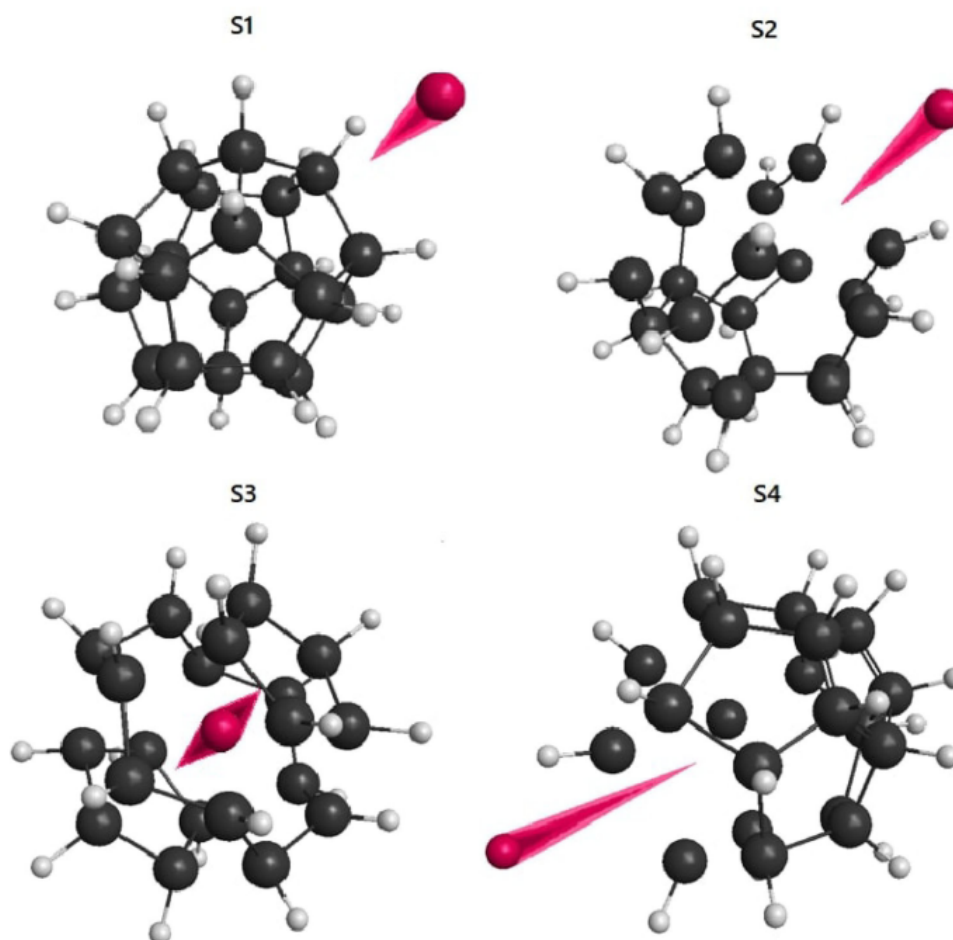


Figura 4.1: Cele patru scenarii ale rezultatului interacțiunii $\text{Ne} - \text{C}_{20}\text{H}_{20}$. *S1* - reflexia neonului de pe primul plan pentagonal întâlnit. *S2* - reflexia neonului din planul pentagonal opus intrării, după ce a pătruns în cușcă și a ieșit prin locul prin care a intrat. *S3* - încapsularea cu succes a atomului de neon. *S4* - penetrarea completă a cuștii și decapsularea prin pentagonul opus celui de intrare.

Adaptare din [7]

scenariu, în care atomul este încapsulat, s-a efectuat o simulare de 4.8 ps. Având în vedere că energia totală se conservă, stabilitatea frecvenței de oscilație a neonului precum și scăderea ratelor de schimb energetic dintre neon și cușcă, s-a ajuns la concluzia că sistemul este stabil pentru cel puțin 4.8 ps și evoluează către o stare de stabilitate crescută.

De asemenea, frecvența principală de oscilație mecanică a neonului, are valoarea de 16 THz, este stabilă pe întreaga durată a simulării și poate fi observată și în spectrul frecvențelor momentului electric dipolar. Din aceasta, ar putea apărea noi aplicații în nanoelectronică bazate pe oscilatorul atomic cu frecvență THz. Mai mult decât atât, este făcută și o comparație cu cazul încapsulării heliului în interiorul dodecahedranului, fiind descris în detaliu în capitoul precedent. Metodele bazate pe aproximația utilizată acolo (HF/6-31G) au dat rezultate bune în comparație cu alte studii și experimente de încapsulare a atomilor de heliu. Aici, pentru încapsularea neonului și studiul post-captură, se folosește un tip de aproximație asemănător (HF/STO-3G), oferind aproape aceleași rezultate ca și HF/6-31G. Luând în considerare că scopul este de a simula o evoluție pe termen lung a sistemului $\text{Ne}@C_{20}\text{H}_{20}$, compromisul de

a folosi un set de funcții de bază mai slab este justificat, având în vedere timpul de calcul câștigat și acordul calitativ bun între spectrul vibrational al cuștii prezis de alte studii sau găsit din experimente și cele determinate aici.

Cazul $H_6@C_{20}H_{20}$

În acest capitol este descrisă o posibilă aplicație a dodecahedranului $C_{20}H_{20}$. Prin intermediul simulărilor de dinamică moleculară, a fost studiat efectul pe care îl are modul normal de vibrație simetric radial al moleculei $C_{20}H_{20}$ asupra a șase atomi de hidrogen încapsulați în moleculă. S-a observat cum cei șase atomi de hidrogen, grupați inițial sub formă moleculară (trei molecule), au început să se apropie unul de altul ca urmare a presiunii ce atinge valori de sute de GPa induse de cușcă.

Hidrogenul, fiind cel mai simplu și mai răspândit element din univers, expune o diversitate captivantă de comportamente fizice în condiții extreme, mai ales la presiuni ridicate. Studiul proprietăților hidrogenului în aceste circumstanțe oferă perspective esențiale asupra aspectelor fundamentale ale fizicii și chimiei. La presiune ambientală standard, hidrogenul există în principal în forma moleculară (H_2), unde fiecare moleculă constă din doi atomi de hidrogen legați printr-o legătură covalentă. Cu toate acestea, pe măsură ce presiunea crește, comportamentul hidrogenului suferă transformări dramatice. Conform predicțiilor teoretice și observațiilor experimentale, hidrogenul trece printr-o serie de faze distincte odată cu creșterea presiunii, ducând în cele din urmă la proprietăți noi și neașteptate.

În 1971, academicianul Vitaly Ginzburg, laureat al Premiului Nobel, a compus o listă a celor mai semnificative provocări din fizică cu care omenirea s-a confruntat și pe care le are de rezolvat în prag de secol XXI [13]. Fuziunea nucleară controlată și superconductivitatea la temperatura camerei au ocupat primele două locuri din această listă, iar hidrogenul metalic a fost clasat pe locul al treilea. Transformarea celui mai simplu element din Univers într-un metal dens s-a dovedit a fi una dintre cele mai captivante și fundamentale întrebări în domeniul fizicii stării condensate. Progresul în transformarea hidrogenului într-un metal solid pare încă a fi departe de realizare [14]. Acest fapt sugerează dificultățile experimentale asociate cu manipularea hidrogenului la densități ridicate. Se presupune că hidrogenul metalic extrem de dens este componenta principală a planetelor joviane, precum Jupiter, și este responsabil pentru generarea proceselor dinamice care conduc la formarea câmpurilor magnetice planetare extraordinare ale acestora [15]. Pentru omenire, fuziunea izotopilor de hidrogen este recunoscută pe scară largă ca fiind singura sursă de energie capabilă să susțină societăți avansate pe parcursul mileniilor.

Astfel, în acest capitol a fost prezentată o posibilă aplicație a dodecahedranului $C_{20}H_{20}$, realizată prin intermediul simulărilor de dinamică moleculară ab initio. Considerând un număr de 6 atomi de hidrogen încapsulați în fullerană, în aproximația teoriei densității funcționalei de sarcină, cu setul de funcții de încercare ales $aug - pseg - 1$ și funcționala RCAM-B3LYP, a fost simulată evoluția sistemului $H_6@C_{20}H_{20}$ în care cușca $C_{20}H_{20}$ pornește dintr-o configurație inițială corespunzătoare unei extensii cu un factor de scalare $k = 1.2$.

Astfel, cușca fiind inițial mărită, intră în compresie, simulând în acest fel modul normal de vibrație simetric radial.

A fost studiat efectul pe care acest mod normal de vibrație îl are asupra sistemului H_6 sechestrat. Au fost analizați o serie de parametrii geometrici, energetici și termodinamici într-un timp total de simulare de 0.5 ps, cu un pas de timp de 0.5 fs. Au fost puse în evidență corelații între diferitele mărimi monitorizate. S-a observat faptul că pe parcursul compresiei cuștii (scăderea razei $C_{20}H_{20}$), sistemul de atomi interni suferă modificări structurale, acestea fiind analizate prin intermediul variațiilor volumului acestuia. Astfel, compresia cuștii duce la compresia H_6 și la modificări dinamice ale nivelelor HOMO și LUMO și ale benzii interzise asociate întregului sistem. Deasemenea, compresia duce la creșterea presiunii asociate sistemului de hidrogeni încapsulați, aceasta atingând valori de ordinul sutelor de GPa. Temperatura calculată cu ajutorul energiei cinetice medii a atomilor de H interni atinge valori în intervalul 70 – 4700 K.

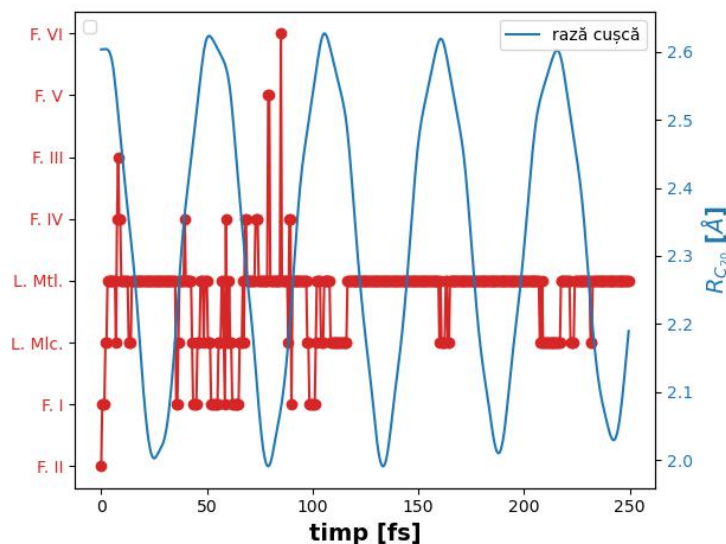


Figura 5.1: Evoluția sistemului în diferite faze și a razei dodecahedranului ca funcție de timp.

Astfel, sistemul de H_6 explorează la fiecare pas de timp câte o stare termodinamică ce într-o diagrama $T - P$ acoperă o regiune întinsă ce conține faze de interes din fizica hidrogenului la presiuni înalte: faze de solid I, II, III, IV, V și VI, precum și două faze lichide: molecular și metalic (figura 5.1). Această posibilă aplicație nouă a fulleranei este de interes în domeniul obținerii hidrogenului la presiuni înalte. Desigur, alte studii în care ar fi simulate cuști moleculare mai mari cu un număr mai mare de atomi încapsulați, sau chiar nanotuburi de carbon care (ambele) ar putea induce presiuni și temperaturi ce caracterizează faze metalice, atât lichid, cât și de solid, sunt necesare. Acest studiu teoretic/computațional, ar putea deschide calea către o nouă metodă de a obține hidrogen dens, astfel încât visul de a obține hidrogen metallic, supraconductor la temperatură ambientală, prima dată exprimat de Wigner și Huntigton [16] în urmă cu aproape 90 de ani, să devină realitate.

De remarcat este că acest studiu se dorește a acoperi o breșă dintre experiment și teorie, unde toate lucrările citate studiază efectele presiunii și temperaturii introduse ca parametri ai unei

simulări, în timp ce acesta propune o modalitate nouă de a obține acele presiuni și temperaturi introduse în calcule numerice.

Concluzii

Această teză investighează proprietățile teoretice și computaționale ale sistemelor de cuști moleculare $X@C_{20}H_{20}$, cu scopul de a înțelege mecanismele și dinamica proceselor de încapsulare și post-încapsulare, având aplicații potențiale în diverse domenii științifice și tehnologice.

Teza este structurată în 6 capitole. Capitolele 1 și 2 oferă o introducere în domeniu și descriu metodele utilizate în simulări.

Capitolul 3 examinează încapsularea heliului (He) în $C_{20}H_{20}$ folosind GAMESS. S-au determinat energiile cinetice inițiale pentru captură fără decapsulare și efectele câmpului electric asupra încapsulării. Sistemul încapsulat a fost analizat pe termen lung, observând stabilitatea crescută și reducerea amplitudinilor frecvențelor.

Capitolul 4 explorează coliziunea neonului cu $C_{20}H_{20}$ prin simulări de dinamică moleculară ab initio. S-au identificat patru rezultate posibile în funcție de viteza inițială a neonului, inclusiv încapsularea pentru viteze între 227.5 și 280 Å/ps. O simulare de 4.8 ps a arătat stabilitatea sistemului și oscilația neonului la 16 THz, sugerând aplicații în nanoelectronică.

Capitolul 5 analizează comportamentul sistemului $H_6@C_{20}H_{20}$ sub compresie. Studiul evidențiază presiunile și temperaturile extreme asociate hidrogenului încapsulat și relevă fazele termodinamice accesibile, deschizând noi perspective pentru obținerea hidrogenului densificat.

Astfel, studiile efectuate în cadrul acestui Program de Doctorat și redate în această teză, scot în evidență potențialul aplicativ al cuștilor moleculare în diverse domenii, de la nanoelectronică la obținerea de materiale cu proprietăți excepționale la presiuni și temperaturi extreme.

Bibliografie

- [1] I.N. Levine. *Quantum Chemistry*, chapter 13.3, pages 407 – 410. Pearson advanced chemistry series. Pearson, 2014.
- [2] F. Jensen. *Introduction to Computational Chemistry*. Wiley, 2017.
- [3] Attila Szabo and Neil S. Ostlund. *Modern quantum chemistry : introduction to advanced electronic structure theory*, chapter 3.2, pages 115–122. McGraw-Hill New York, 1989.
- [4] Dominic Marx and Jürg Hutter. *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*, chapter 2.3, pages 24–27. Cambridge University Press, 1 edition, 2009.
- [5] M.W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. J. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, and J. A. Montgomery. General atomic and molecular electronic structure system. *J.Comput.Chem.*, 14:1347–1363, 1993.
- [6] Leonard Constantin Gebac, Mircea Bercu, and Valeriu Filip. Molecular dynamics of he encapsulation in the c20h20 cage at the threshold energy. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 31(5):448–458, 2023.
- [7] Leonard Constantin Gebac and Alexandru Niculescu. Encapsulating ne inside c20h20. a molecular dynamics study on the stability of the endohedral system. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, 31(6):583–591, 2023.
- [8] R. James Cross, Martin Saunders, and Horst Prinzbach. Putting helium inside dodecahedrane. *Organic Letters*, 1:1479–1481, 1999.
- [9] Niall J. English and Conor J. Waldron. Perspectives on external electric fields in molecular simulation: progress, prospects and challenges. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17:12407–12440, 2015.
- [10] Erik Neyts, Axel Maeyens, Geoffrey Pourtois, and Annemie Bogaerts. A density-functional theory simulation of the formation of Ni-doped fullerenes by ion implantation. *Carbon*, 49:1013–1017, 2011.
- [11] Erik Neyts and Annemie Bogaerts. Formation of endohedral Ni@C₆₀ and exohedral Ni–C₆₀ metallofullerene complexes by simulated ion implantation. *Carbon*, 47:1028–1033, 2009.
- [12] A. D. Zakirova and D. Sh. Sabirov. Volume of the fullerene cages of endofullerenes and hydrogenated endofullerenes with encapsulated atoms of noble gases and nonadditivity of their polarizability. *Russ. J. Phys. Chem.*, 94:963–971, 2020.

- [13] Vitaly L Ginzburg and Vitaly L Ginzburg. What problems of physics and astrophysics seem now to be especially important and interesting (thirty years later, already on the verge of the 21st century)? *The Physics of a Lifetime: Reflections on the Problems and Personalities of 20th Century Physics*, pages 149–197, 2001.
- [14] Eugene Gregoryanz, Cheng Ji, Philip Dalladay-Simpson, Bing Li, Ross T. Howie, and Ho-Kwang Mao. Everything you always wanted to know about metallic hydrogen but were afraid to ask. *Matter and Radiation at Extremes*, 5(3):038101, 04 2020.
- [15] Tristan Guillot. The interiors of giant planets: Models and outstanding questions. *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, 33:493–530, 2005.
- [16] E. Wigner and H. B. Huntington. On the Possibility of a Metallic Modification of Hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 3(12):764–770, 12 1935.

Lista contribuțiilor proprii

7.1 Lucrări publicate în reviste

7.1.1 Reviste cotate ISI

1. *Leonard Constantin Gebac*, Mircea Bercu*, Valeriu Filip (2023) Molecular dynamics of He encapsulation in the C₂₀H₂₀ cage at the threshold energy, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures **31**, 448–458 (AIS = 0.248)
2. *Leonard Constantin Gebac**, Alexandru Niculescu (2023) Encapsulating Ne inside C₂₀H₂₀. A molecular dynamics study on the stability of the endohedral system, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures **31**, 583–591 (AIS = 0.248)
3. Marian Mogildea, Marian Mogildea, George Mogildea, Sorin I Zgura, Doina Craciun, Natalia Mihăilescu, Petronela Prepelita, Laura Mihai, Marian C Bazavan, Vasile Bercu, *Leonard Constantin Gebac*, Raluca Maier, Bogdan S Vasile, Valentin Craciun (2023) A New Method for Tungsten Oxide Nanopowder Deposition on Carbon-Fiber-Reinforced Polymer Composites for X-ray Attenuation, Nanomaterials **13**, 3071 (AIS = 0.712)

7.2 Lucrări în curs de publicare

7.2.1 Reviste cotate ISI

1. *Leonard Constantin Gebac** (2024) Ab Initio Molecular Dynamics Simulations of High-Pressure Hydrogen within Fullerane Cage, Nature Communications, status: manuscript submitted

7.3 Lucrări prezentate la conferințe

7.3.1 Conferințe internaționale

1. *Leonard Constantin Gebac*, Mircea Bercu, (2021) Investigation on Helium vibration inside C₂₀H₂₀ molecular cage, INTERNATIONAL ASIAN CONGRESS ON CONTEMPORARY SCIENCES - V, 1-2 iunie 2021, Nakhchivan State University, Azerbaijan

7.3.2 Conferințe naționale

1. Nicoleta-Claudia JERCA, Leonard Constantin GEBAC, (2021) Structure of a hydrogen cluster inside of the dodecahedrane molecular cage, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2021
2. Mihaela-Alina MUNTEANU, Leonard Constantin GEBAC, (2021) Encapsulation of Li inside dodecahedrane, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2021

3. Alexandru-Ionut NICULESCU, Mihaela-Alina MUNTEANU, Leonard Constantin GEBAC, (2022) The encapsulation of Ne inside dodecahedrane molecular cage, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2022
4. Leonard Constantin GEBAC, Mircea BERCU, Valeriu FILIP (2022) Formation mechanism of endohedral He@C₂₀H₂₀, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2022
5. Rada-Mihaela COSINSCHI, Alina-Mihaela MUNTEANU, Leonard Constantin GEBAC, (2022) Energies and Dipole Interactions of the Dynamic Endo-Exohedral Dodecahedrane complex He@C₂₀H₁₈-Be₂C₂O, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2022
6. Sorin-Theodor BRĂTESCU, Mihaela-Alina MUNTEANU, Leonard Constantin GEBAC, (2022) Study of Helium dimer in C₂₀H₂₀ molecular cage, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2022
7. Leonard Constantin GEBAC, Mircea BERCU, Valeriu FILIP (2022) Encapsulation of He inside C₂₀H₂₀ in the presence of static electric field, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2022
8. Mihaela-Alina MUNTEANU, Leonard Constantin GEBAC, (2022) Study of stability of He@C₂₀H₂₀ in the presence of an electric field, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2022
9. Ionuț SLABU, Tudor ȘUTEU, Alexandru NICULESCU, Mihaela COSINSCHI, Vasile BERCU, Leonard Constantin GEBAC, (2023) Artificial intelligence enhanced image analysis in atomic emission spectroscopy, Sesiunea Științifică a Facultății de Fizică, iunie 2023

7.4 Lucrări de Licență Îndrumate

1. Nicoleta-Claudia JERCA, Asis. Univ. Drd. Leonard Constantin GEBAC, Conf. Univ. Dr. Vasile Bercu (2021) OBSERVABLE PHASES OF HYDROGEN CLUSTER IN A DODECAHEDRANE CAGE-LIKE STRUCTURE
2. Mihaela-Alina MUNTEANU, Asis. Univ. Drd. Leonard Constantin GEBAC, Conf. Univ. Dr. Vasile Bercu (2021) ÎNCAPSULAREA ATOMULUI DE LITIU IN DODECAHEDRANUL C₂₀H₂₀
3. Alexandru NICULESCU, Asis. Univ. Drd. Leonard Constantin GEBAC, Conf. Univ. Dr. Vasile Bercu (2022) ÎNCAPSULAREA ATOMULUI DE NEON IN DODECAHEDRANUL C₂₀H₂₀
4. Rada-Mihaela COSINSCHI, Asis. Univ. Drd. Leonard Constantin GEBAC, Conf. Univ. Dr. Vasile Bercu (2022) STUDIUL ENERGHIILOR ȘI INTERACȚIILOR DE DIPOL ALE COMPLEXULUI DINAMIC ENDO-EXOEDRAL PE BAZĂ DE DODECAHEDRAN He@C₂₀H₁₈-Be₂C₂O
5. Sorin-Theodor BRĂTESCU, Asis. Univ. Drd. Leonard Constantin GEBAC, Conf. Univ. Dr. Vasile Bercu (2022) STUDIUL DIMERULUI DE HELIU ÎNCAPSULAT ÎN MOLECULA C₂₀H₂₀
6. Ionuț SLABU, Asis. Univ. Drd. Leonard Constantin GEBAC, Conf. Univ. Dr. Vasile Bercu (2023) ALGORITMI DE INTELIGENȚĂ ARTIFICIALĂ ÎN ANALIZA DE IMAGINE A SPECTRELOR ATOMICE DIN DOMENIUL VIZIBIL