

List of abstracts from the papers of the applicant used in acquiring PhD  
Събрани абстракти от научни трудове на кандидата използвани за придобиване на научна  
степен „доктор“

Miroslav Georgiev and Hassan Chamati, **Magnetic excitations in molecular magnets with complex bridges: the tetrahedral molecule Ni<sub>4</sub>Mo<sub>12</sub>**, Eur. Phys. J. B, 92:93, 2019

**Abstract.** We investigate the spectroscopic magnetic excitations in molecular magnets with complex intermediate structure among the magnetic ions. Our approach consists in introducing a modified spin Hamiltonian that allows for discrete coupling parameters accounting for all energetically favorable spatial distributions of the valence electrons along the exchange bridges connecting the constituent magnetic ions. We discuss the physical relevance of the constructed Hamiltonian and derive its eigenvalues. The model is applied to explore the magnetic excitations of the tetrameric molecular magnet Ni<sub>4</sub>Mo<sub>12</sub>. Our results are in a very good agreement with the available experimental data. We show that the experimental magnetic excitations in the named tetramer can be traced back to the specific geometry and complex chemical structure of the exchange bridges leading to the splitting and broadness of the peaks centered about 0.5 meV and 1.7 meV.

**Абстракт.** В тази статия изследваме спектроскопичните магнитни възбуждания на молекулни магнити със сложна мостова структура от атоми свързваща магнитните йони. Предложения подход се състои във въвеждане на модифициран спинов Хамилтониан, който включва параметри имащи дискретен спектър от стойности, отчитащи всички енергийно благоприятни пространствени разпределения на валентните електрони по обменните мостове свързващи съставните магнитни йони. В допълнение обсъждаме физическата значимост на конструирания Хамилтониан и представяме неговите собствени стойности. Моделът се прилага за изследване на магнитните възбуждания на молекулярният магнит Ni<sub>4</sub>Mo<sub>12</sub>. Получените теоретични резултати са в много добро съответствие с наличните експериментални данни. Съответно, ние показваме, че експерименталните магнитни възбуждания в посочения тетрамер са следствие от специфичната геометрия и сложна химическа структура на обменните мостове, водещи до разцепване и оширение на пиковите, центрирани около 0,5 meV и 1,7 meV.

Miroslav Georgiev and Hassan Chamati, **MAGNETIC EXCITATIONS IN THE TRIMERIC COMPOUNDS A<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> (A = Ca, Sr, Pb), C.R. Acad. Bulg. Sci., 72:29-37, 2019**

**Abstract.** We study the magnetic excitations of the trimeric magnetic compounds A<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> (A = Ca, Sr, Pb). The spectra are analyzed in terms of the Heisenberg model and a generic spin Hamiltonian that accounts for the changes in valence electrons distribution along the bonds among magnetic ions. The analytical results obtained in the framework of both Hamiltonians are compared to each other and to the available experimental measurements. The results based on our model show better agreement with the experimental data than those obtained with the aid of the Heisenberg model. For all trimers, our analysis reveals the existence of one thin energy band referring to the flatness of observed excitation peaks.

**Абстракт.** В тази статия изучаваме магнитните възбуждания на тримерните магнитни съединения A<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> (A = Ca, Sr, Pb). Спектрите са анализирани по отношение на

модела на Хайзенберг и обобщен спинов Хамилтониан, който отчита промените във разпределението на валентни електрони по обменните мостове свързващи магнитните йони. Аналитичните резултати, получени в рамките на двамата хамилтониана, се сравняват един с друг, както и с наличните експериментални измервания. Резултатите, базирани на нашия модел, показват по-добро съгласие с експерименталните данни, отколкото тези, получени с помощта на модела на Хайзенберг. За всички тримери, нашият анализ разкрива съществуването на една стеснена енергетична зона имаща отношение към стеснената форма на наблюдаваните пикове на магнитно възбуждение.

Miroslav Georgiev and Hassan Chamati, **Magnetic Exchange in Spin Clusters. AIP Conf. Proc.**, 020004, 2019

**Abstract.** We investigate the role of exchange bridges in molecular magnets. We explore their effects on the distribution of the valence electrons and their contribution to the exchange processes. The present study is focused on a spin-half dimer with nonequivalent exchange bridges. Here, we derive an effective Hamiltonian that allows for an accurate estimation of the observables associated to the magnetic properties of the magnet. Our results are compared to those obtained by means of the conventional Heisenberg model that usually fails.

**Абстракт.** В настоящия труд изследваме ролята на обменните мостове в молекулните магнити. Изучаваме тяхното въздействие върху разпределението на валентните електрони и техния принос към обменните процеси. Като примерен модел на молекула, настоящото изследване се фокусира върху спи една втора димер включващ в състава си два не еквивалентни обменни мостове. В рамките на разгледания димер извличаме ефективен хамилтониан, който позволява точна оценка на наблюденията, свързани с магнитните свойства на молекулата. Получените резултати са сравнени с тези получени от прилагането на модела на Хайзенберг.

Miroslav Georgiev and Hassan Chamati, **A systematic approach to determine the spectral characteristics of molecular magnets**, arXiv:1805.01382, 2018

**Abstract.** We devise a formalism to investigate in a systematic way the spectroscopic magnetic excitations in molecular magnets. This consists in introducing a bilinear spin Hamiltonian that allows for discrete coupling parameters accounting for distinct spin coupling mechanisms among the constituent magnetic ions, as well as the influence of the nonmagnetic ions in the system. The model is applied to explore the magnetic excitations of the trimeric magnetic compounds  $A_3Cu_3(PO_4)_4$  ( $A = Ca, Sr, Pb$ ) and the tetrameric molecular magnet  $Ni_4Mo_{12}$ . Our results are in a very good agreement with the available experimental data: For all trimers  $A_3Cu_3(PO_4)_4$ , calculations reveal the existence of one thin energy band referring to the flatness of observed excitation peaks. Moreover for the tetramer  $Ni_4Mo_{12}$ , we concluded that the magnetic excitations may be traced back to the specific geometry and complex chemical structure of the exchange bridges leading to the splitting and broadness of the peaks centered about 0.5 meV and 1.7 meV.

**Абстракт.** В настоящата статия разработваме формализъм, за да изследваме по систематичен начин спектроскопичните магнитни възбуждания в молекулни магнити. Това се състои във въвеждането на билинеен спинов хамилтониан, който включва дискретни параметри

отчитащи различни механизми на спиново свързване сред съставните магнитни йони, както и влиянието на немагнитните йони в системата. Моделът се прилага за изследване на магнитните възбуждания на тримерните магнитни съединения  $A_3Cu_3(PO_4)_4$  ( $A = Ca, Sr, Pb$ ) и тетрамерния молекулен магнит  $Ni_4Mo_{12}$ . Нашите резултати са в много добро съответствие с наличните експериментални данни: За всички тримери  $A_3Cu_3(PO_4)_4$ , изчисленията разкриват съществуването на една тънка енергетична зона, отнасяща се до плоскостта на наблюдаваните пикове на възбуждане. Освен това за тетрамера  $Ni_4Mo_{12}$  заключихме, че магнитните възбуждания могат да бъдат проследени до специфичната геометрия и сложна химическа структура на обменните мостове, водещи до разцепване и оширение на пиковите центрирани около 0,5 meV и 1,7 meV.

Miroslav Georgiev and Hassan Chamati, **Spin multipole moments as collective quantum phenomena**, *J. Phys. Conf. Ser.*, 794:012026, 2017

**Abstract.** In this paper we investigate the occurrence of multipole moments of a collection of spins in a quantum magnetic system. To get insights into the behaviour of such systems we start by considering small spin clusters composed of dimers, trimers, as well as mixed spin systems with four spins. We focus our attention on the quantum multipole states, that gave rise to the widely discussed spin nematic and spin liquid phases. The magnetic properties of these systems are computed and the main differences between bosonic and fermionic multipolar states are discussed.

**Абстракт.** В тази статия изследваме появата на мултиполни спинови моменти в квантова магнитна система. За да добием представа за поведението на такива системи, разглеждаме малки спинови кълстери, съставени от димери, тримери, както и смесени спинови системи с четири спина. Съсредоточаваме вниманието си върху квантовите мултиполни спинови състояния, които имат пряко отношение към широко обсъжданите спинови нематични и спинови течни фази. Магнитните свойства на тези системи са изчислени, обсъждат се и основните разлики между бозонните и фермионните мултиполни спинови състояния.