

АНОТАЦИЯ
на дисертационен труд
на Мирослав Георгиев, секция ДУМФ на ИМИ - БАН

Дисертацията е посветена на научни проблеми в областта на наноманетизма, а именно теоретичното изследване на магнитните свойства на наноманетни системи. Например, самостоятелни молекулярни магнити и изолирани магнитни единици като съставна част на по-сложни химични съединения. В дисертацията се разглежда влиянието на структурата и вида на междуатомните връзки в наноманетните системи върху техните магнитни свойства. За отчитане ролята на тези връзки е разработен метод базиран на теорията на молекулярните орбитали и метода на много-конфигурационното самосъгласувано поле. В рамките на предложения метод са поставени две задачи: Първата включва пълно характеризиране на експериментално наблюдаваните магнитни спектри на изолираните спин една втора тримери, съставлящи съединенията $A_3Cu_3(PO_4)_4$ ($A=Ca, Sr, Pb$). Втората задача касае обяснението на причините за експериментално наблюдаваните необикновени магнитни свойства на молекулярния магнит Ni_4Mo_{12} . Това включва пълен анализ на магнитния спектър, намагнитването и магнитната възприемчивост, както и посочване на причините за наблюдаваните свойства.

ANNOTATION
on dissertation
of Miroslav Georgiev, department DEMP at IMI BAS

The thesis focuses on problems in the field of nanomagnetism. This research area covers the magnetic properties of nanomagnetic systems, for example molecular magnets and isolated spin units embedded in larger compounds. In the present dissertation we address the impact of the nanomagnet's structural symmetry and type of atomic bondings on their magnetic properties. To account for the effect of these features, we developed an alternative to the conventional spin techniques method. As a foundation of our research we used the molecular orbital theory, the multi-configuration self consistent field method and the inelastic neutron scattering theory. With the aid of the named method we study two particular problems. The first problem refers to the characterization of the unusually stable high-temperature magnetic excitation observed in the compound $Pb_3Cu_3(PO_4)_4$. The second problem is associated to the unusual magnetic properties of the molecular magnet Ni_4Mo_{12} .