

Справка за научните постижения

на проф. д-р Х. Шамати

Научните приноси, с които участвам в конкурса са в различни области на теорията на кондензираното състояние: теорията на фазовите преходи и критичните явления, различни аспекти на материалознанието и математическото моделиране. Научните резултати са публикувани в 100 научни труда включително дисертациите за получаване на научните степени кандидат на физическите науки (доктор) и доктор за физиките науки. Останалите статии са отпечатани преимуществено в най-реномирани специализирани научни списания, индексирани в международни бази данни за научна информация SCOPUS (89 публикации) и WOS (82 публикации, от които 62 в списания с IF), материали на конференции в пълен текст, препринти на ICTP – Trieste (Италия), ОИЯИ–Дубна (Русия) и arXiv (<http://arxiv.org>).

Богатото разнообразие на свойствата на нискоразмерни наноструктурирани и молекулни материали предоставя огромен потенциал за тяхното практическо приложение за ежедневните нужди. Те могат да се използват в направата на прибори за различни технологични сфери като електрониката, сензориката, фотониката, енергетиката и други. Провежданите теоретични изследвания имат за цел изясняване ролята на многочастичните взаимодействия, включващи множество степени на свобода и въздействието на външни източници в материалите и възможността за контрол върху техните свойства. Основната цел е изучаването на основните физически механизми, които водят до появата на в нискоразмерни квантови и класически физически системи под въздействието на външен източник или наличие на нехомогенности. От тези фундаментални по характер научни изследвания са получени нови знания и по-задълбочено разбиране на свойствата на физически моделни системи и способността им за правилното описание на традиционни и нови магнитни нискоразмерни и наноструктурирани материали. Изследванията касаят фундаментални аспекти във физиката и са приложими в съвременното материалознание и нанотехнологията. Научните постижения могат да бъдат разпределени в четири групи:

Далечно подреждане в някои точно решаемы квантови модели

Работите [1–3, 5, 6] са посветени на връзката между две широко използвани мерки за далечно подреждане в теорията на фазовите преходи. Първата е свързана със спонтанното нарушаване на симетрията чрез въвеждане на външно поле и по същество представлява рецепта за класифициране на чистите фази (или състояния) в една система изпитваща фазов преход. При работа с компютърни симулации на фазовите преходи се прибегва до използването на друга мярка свързана с т. нар. средно–квадратичен параметър на подреждане, характеризиращ смес от чисти фази (състояния). В теорията на фазовите преходи се използват и двете мерки, като съществува твърдение, че те в известен смисъл съпадат. Проблемът за тяхната еквивалентност е класически, като математически строго е установено само неравенство между тези две мерки за далечно подреждане в редица важни за теорията моделни системи.

В работите [1–3, 5, 6] проблемът за еквивалентността е разгледан в рамките на два точно решаемы модела (един модел е точно решаем, тогава когато неговите термодинамични характеристики могат да се изразят чрез известни функции в затворена форма). Първият описва фазов преход от парамагнитно в антиферомагнитно състояние в системи с взаимодействащи колективизирани електрони и локализиращи магнитни примеси. Важна особеност на изследвания модел е възможността да се изследва фазовият преход в зависимост от степента на легиране (броя на електрони

на възел) на системата, която в случая определя различната степен на конгруентност между участъци от повърхностите на Ферми. Изследвана е термодинамиката на този модел при нулева [1, 6] и отлична от нула температура [4, 6]. Построена е фазовата диаграма на системата в равнините температура – химичен потенциал и температура – среден брой електрони на възел. Операторът определящ параметъра на подреждане в този случай има векторен характер (трикомпонентен вектор). Той не комутира с хамилтониана на моделната система. Показано е, че двете дискутирани по-горе мерки за далечно подреждане са равни с точност до множител $r = \sqrt{3}$ (3 е броят на компонентите на оператора, определящ параметъра на подреждане). Установено е, че този резултат е в известен смисъл универсален: той не зависи от запълването на електронната зона (от средната електронна концентрация на възел) нито от температурата на фазовия преход [6].

Изследвано е n -компонентното обобщение, с кубична анизотропия, на модел, описващ структурен фазов преход от типа отместване, за който приближението за самосъгласуваните фонони дава точно решение в термодинамичната граница [3]. Построен е апроксимиращ хамилтониан, с помощта на който е изчислена свободната енергия на модела. Намерена е област, чиято граници се определят от условие върху константите на взаимодействието, в която съществува точното решение. Точно е определено отношението между параметъра на подреждане и средноквадратичния параметър на подреждане за този модел, \sqrt{n} , и е показано, че то не зависи от флуктуациите в системата (класически и/или квантови).

Ефект на взаимодействието и крайната геометрия върху преходното поведение

Теорията на фазовите преходи се основава на разглеждане на „идеализирани“ класически модели, например моделът на Изинг (Ising): система от магнитни моменти (намиращи се на възлите на проста кубична решетка), всеки от които има две възможни състояния. За простота се предполага, че взаимодействието е само между най-близки съседни моменти. За такива системи статистическата физика дава детайлно описание на поведението на редица термодинамични величини в непосредствена близост до точката на фазовия преход. Фазовите преходи от своя страна са свързани със сингулярности (имамщи място в термодинамичната граница: безкраен обем и безкраен брой на моменти при постоянна плътност) на термодинамичните величини. Въпреки относително простия им вид, тези модели могат да описват много добре преходното поведение на някои реални вещества. Тези открития се потвърждават и от най-прецизните експерименти. От друга страна съществуват и други случаи, в които трябва да се отчитат и други свойства, като симетрията, характера и обсега на взаимодействието или комбинация от тях. Такива взаимодействия отичат например наличието на дефекти, кулонови взаимодействия или електромагнитни флуктуации. Те могат да повлияят на рода на фазовия преход, който има място в идеалните модели или не го допускат.

Освен характера на взаимодействието, термодинамичното поведение се влияе и от геометричната форма на системата, изследвана посредством експериментални техники или компютърно моделиране. Такива системи са или крайни във всички направления (напълно крайни), или тънки слоеве. Ефектите на крайните размери на системата и граничните условия са от фундаментално значение за съвременната теория на фазовите преходи. Нарастващата роля на компютърното моделиране дава силен тласък за развитието на теорията при конкретното изследване на преходни явления свързани с магнетизма, свръхпроводимостта, структурните фазови преходи и др. Особено важни за теорията са скейлинговите свойства на различните термодинамични величини, като свободната енергия, възприемчивостта и др. Например, частните значения на скейлинговите фун-

кции в точката на фазов преход от втори род определят т.нар. критични амплитуди. Критичната амплитуда, даваща поправките към свободната енергия при наличие на краен размер се нарича амплитуда на Казимир. Тя е свързана с т. нар. ефект на Казимир в критични системи. Именно с ефекта на Казимир в последно време са свързани надеждите за експериментално наблюдение на редица „тънки“ крайно–размерни ефекти в критични системи.

Голяма част от научната ми дейност е посветена на описание и анализ на ефекти свързани с характера на взаимодействието в комбинация с крайната геометрия на системата. Поради естеството на взаимодействията и геометрията разгледани в трудовете, изследването на системите изисква използването и развитието на подходящ математически апарат. Целта е обяснение на термодинамичните свойства на такива системи. Разгледаните системи са едни от най–популярните модели в класическата и квантовата теория на фазовите преходи, като в тях се отчита наличието на взаимодействие характерно за дадено вещество. Тези модели описват ефективно ферромагнетици с далекодействащо или анизотропно взаимодействие, неподредени системи с неподвижни (замразени) примеси, флуиди и други. Изследвана е крайна геометрия с наложени различни видове гранични условия. В околност на точката на фазовия преход са изследвани различни термодинамични величини: свободна енергия, възприемчивост, специфичната топлемост и др., като специално внимание е отделено на скейлинговото им поведение в различните области на фазовата диаграма.

Изследвано е също и взаимното влияние на квантовите и класическите флукуации в някои от моделите. Интересът към квантовите фазови преходи се засилва през последните години във връзка с нарасналите възможности на експеримента и синтезирането на вещества, в които класическите и квантовите флукуации ефективно взаимодействат. В системи, изпитващи квантови фазови преходи, температурата играе двойка роля. Ще напомня, че квантовите фазови преходи имат място при нулевата абсолютна температура. При достатъчно ниски температури квантовите ефекти са съществени, като в този случай температурата „променя“ геометрията на системата, добавяйки един „нов“ ефективен размер. При увеличаване на температурата, системата се извежда от състоянието, в което квантовите критични явления са съществени, като при достатъчно висока температурата имаме класическа физическа картина. Изследванията в тази област включват такива принципни въпроси, като квантово–класически преход (crossover) и приложимост и обобщение на крайно–размерното подобие. Особено интересни са тези изследвания, които вземат под внимание флукуациите, нарушаващи симетрията между пространствените и времевата размерност на системата. Проверени са различни хипотези на скейлинг, част от които се дискутират в литературата, а други са предложени в нашите работи.

В представените работи [5–21,23,25,28,32,35,41,43,45,46] са изследвани три от най–популярните модели в класическата както и в квантовата теория на фазовите преходи. Това са: моделът на квантовите ротори, средно–сферичният модел и моделът на Гинзбург–Ландау. Последните два модела могат да бъдат с квантови и/или класически флукуации, като в тях се допуска наличието на най–различни видове взаимодействия, което може да измени поведението при фазовия преход. Тези модели описват най–важните черти на критичното поведение на редица физически системи, като: магнетизъм, спинови стъкла, вещества със структурни фазови преходи, материали с примеси, свръхфлуиди и др.

Разработени са оригинални методи, които свеждат математическата задачата до намирането на асимптотични суми, в които броят на членовете, както и самите членове, зависят от крайния пространствен размер и от допълнителни параметри, като температурата на системата, квантовия параметър или от двете. При изчисляването на тези асимптотики обикновено се срещат значителни трудности, особено в многомерния случай. Разработеният подход, на базата на функцията

на Миттаг–Лефлер (Mittag–Leffler) и нейното обобщение, позволява точното отчитане на различни крайно–размерни ефекти (в различни асимптотични режими) не само в рамките на разглежданите модели, но и в много по–обща случаи, включващи дори и случая на анизотропия. Резултатите от тази дейност са обобщени в работите [32, 43]. Остава да се отбележи, че преглед на част от получените в този раздел резултати е направен в обзора [23].

Направен е подробен анализ [43] на ефектите на крайния размер върху обемното критично поведение на класически d мерен средно сферичен модел с крайна дебелина. В направлението на крайния размер са наложени най различни гранични условия: периодични, антипериодични и такива описващи свободни граници. Предложен е нов метод, който позволява получаването на явни изрази за свободната енергия и на уравнението за сферичното поле при произволна размерност. Показано е, че при периодични гранични условия скейлинговото поведение има място, докато при свободните гранични условия стандартния скейлинг се нарушава. е изследвано подробно поведението на свободната енергия, в тримерния случай, и са определени някои критични амплитуди.

Представено е [45] пълно изследване посредством ренорм–групова теория на полето на критичното динамично поведение на стохастични модели без запазване на параметъра на подреждане или взаимодействие с други бавни променливи в тънки слоеве с периодични и свободни гранични условия. Обърнато е специално внимание на случаите, когато в класическата (средно–полева) теория са замесени нулеви моди при критичната температура на обемната система. Това се случва, когато двете повърхности „ограничаващи“ слоя търпят „специален“ фазов преход или на тях са наложени периодични гранични условия. Заради нулевия мод, широко използвания метод базиран на разложение в близост до горната критична размерност дава грешно поведение и се налага реорганизация на теорията на полето. Това се извършва, чрез построяване на ефективно действие за нулевата мода на параметъра на подреждане. Получени са явни резултати за скейлинговите функции на възприемчивостта на тънкия слой като функция на температурата в непосредствена близост до критичната точка и тези на повърхността и вътрешността на слоя в критичната точка до най–нисък нетривиален порядък по ϵ . Показано е, че отместването на мултикритичната специална точка зависят от температурата и от характера на граничните условия.

Моделът на квантовите ротори и квантовият модел на Гинзбург–Ландау с обобщено взаимодействие, спадащо с разстоянието между магнитните моменти по степенен закон, са изследвани [5, 6, 9, 10, 12] в т. нар. сферично приближение, отговарящо на границата на векторни спинове с безкраен брой компоненти, при съответна нормировка на спин–спиновото взаимодействие. Изследвана е крайна геометрия от най–общ вид – част безкрайни и част крайни размери, на които са наложени периодични гранични условия. В околност на критичната точка са изследвани различни термодинамични величини: свободна енергия, възприемчивост, корелационната дължина, сили на Казимир и др., като специално внимание е отделено на скейлинговото им поведения в различните области на фазовата диаграма. Изследвано е също и взаимното влияние на квантовите и класическите флуктуации при различни геометрии. Благодарение на факта, че в сферичната граница моделите допускат точно решение, са проверени различни хипотези на подобие, част от които се дискутират в литературата, а други са предложени в нашите работите. Намерените в параметричното пространство (температура, квантов параметър) области: ренормализирана класическа, квантова критична и квантова неподредена, в комбинация с двата режима – при ниски температури и много ниски температури, определят съдържателността на моделите за теорията на крайноразмерните системи, като точно решаемы при произволна размерност на пространството от една страна и описващ най–важните черти на квантовите модели от друга [9, 10, 12, 13, 47].

В рамките на средно-сферичният модел, с далекодействащо взаимодействие, спадащо по степенен закон с разстоянието между магнитните моменти, е предложена обобщена формула [7, 8], която дава израз за крайно-размерното отместване на обемната критична температура за системи с най-обща геометрия.

В рамките на средно-сферичен модел с периодични гранични условия за системи с далекодействащо взаимодействие са получени точни резултати за поведението на свободната енергия и силата на Казимир [25, 28]. Получени са строги резултати за монотонността на добавъчната свободна енергия,¹ ненулево температурната C -функция на Замолодчиков и силата на Казимир. Показано е, чрез аналитични изчисления, че в неподредената фаза, повърхностите, ограничаващи изследваната система, винаги се привличат вследствие на силата на Казимир. Същото остава валидно в подредената фаза и при определени значения на параметъра контролиращ спадането на взаимодействието. За квантовия модел е разгледано поведението на свободната енергия на система с обща геометрия при периодични гранични условия и при ниски температури. Скейлинговите свойства са представени в работата [15]. Пресметнати са критичните амплитуди на Казимир - както по отношение на размера на системата, така и по температура. Предложено е и обобщение на C -функцията на Замолодчиков, въведена за квантови системи.

Предложено е обобщение на похода на Брезен-Зин-Жустен (Brézin & Zinn-Justin), базиран на разложение по нулевия мод, за изследване на крайно-размерни критични ефекти, в съчетание с метода на ренорм група. Обобщението е удобно и има преимущества при пресмятане на различни термодинамични характеристики, например възприемчивостта и кумуланта на Биндер (Binder), в случай на системи с далекодействие [16, 19, 21, 23] така както и системи с случайно разпределени замразени примеси [18, 20]. В рамките на модела с далекодействащо взаимодействие спадащо с разстоянието по степенен закон, са проверени изказаните от нас предсказания на теорията на крайно-размерния скейлинг свързани с крайната геометрия на системата и характера на взаимодействието (близкодействие, "степен" на далекодействието) при краен брой на компонентите на полето до първи порядък по "отклонение от горната критична размерност" и при произволно значение на размерността на системата. Когато взаимодействието е ван дер Валсово (van der Waals) е показано, че то води до доминиращи крайно-размерни приноси в неподредената фаза далеч от критичната точка. Изследванията на моделната система със случайно разпределени примеси са теоретична база за интерпретацията на различни числени резултати получени с метода Монте Карло и др., област, която в настоящия момент бурно се разработва. Предложена е обща схема за анализ на скейлинговите свойства на неподредени системи с крайна геометрия. Използван е методът на репликите, за да се „премахне“ неподредеността в системата, което усложнява анализа на такива системи в сравнение с чистите им аналози. Пресметнати са някои критични амплитуди.

Разгледана [36, 41] е подробно критичната динамика на крайна, случайно разредена, магнитна система с Гаусово корелирани дефекти. Граничните условия наложени на системата са периодични. Динамиката се базира на релаксационен стохастичен модел, при който параметърът на подреждане не се запазва и не взаимодейства с други бавни променливи. Изследванията са проведени в рамките на модел на Гинзбург-Ландау със случайна критична температура, използвайки метода на ренорм груповата теория на полето. Изведени са скейлинговите закони, описващи поведението на релаксационното време, когато системата релаксира от високо температурната фаза към своята обемна критична температура. Изчисленията показват, че релаксационното време зависи степенно от линейния размер на система в критичната точка. Скейлинговата функция свързана с тази

¹Добавъчната свободна енергия е разликата между свободната енергия на крайната система и тази на обемната.

величина е постоянна при малък скейлингов параметър, зависещ от температурата и линейния размер, и е монотонно намаляваща далеч от критичната температура.

Изследвано е [29, 30, 36, 40, 42, 48] влиянието на „подвижни“ примеси върху термодинамичните свойства като цяло и на фазовата диаграма в частност на разредени двумерни и тримерни магнитни модели. В чистата (без примеси) решетка моделите изпитват фазови преходи от типа Березинский–Костерлитц–Таулес (Berezinskii–Kosterlitz–Thouless) и втори род, съответно. Пресметнати са редица термодинамични величини в това число и такива характерни за флуиди. Използван е метода Монте Карло в големия каноничен ансамбъл, където концентрацията на примесите се определя от химичен потенциал. Предимствата на този метод пред директното пресмятане в каноничния ансамбъл (с постоянна плътност), е възможността на плътността на примесите да флукутира. Получените резултати за различни размери на решетката са анализирани с помощта на теорията на крайно–размерно подобие. Поведението на различните термодинамични величини показва, че фазовия преход си сменя рода при определена стойност на химичния потенциал. В двата случая той става от първи род. Температурата на фазовия преход намалява с увеличаване на примесите в системата. Подобно поведение е наблюдавано е в случай на модели с анизотропно взаимодействие в спиновото пространство и наличие на примеси.

Разгледана [31, 34, 38, 48] е двумерна и тримерна обобщена анизотропна версия на модела XY, в която флукуациите на компонентата на спина извън равнината XY се контролират от специално въведен параметър p . При $p = 1$ моделът е еквивалентен на известния в литературата модел XY, който изпитва фазов преход от типа Березинский–Костерлитц–таулес (Berezinskii–Kosterlitz–Thouless) в случай на двумерна решетка и фазов преход от втори род в тримерната. Проведени са подробни изследвания с помощта на метода Монте Карло за различни стойности на p и данните са анализирани с помощта на теорията на крайно–размерното подобие. Получените резултати показват, че при малко p , критичното поведение на системата съвпада с това на оригиналния модел XY, докато при големи стойности на p , фазовият преход в системата става от първи род. Получено е трикритично поведение в тримерния случай. Установено е че, температурата на фазовия преход намалява като функция на параметъра p за всяка размерност на решетката.

В литературата са известни два подхода за описанието на критичното поведение на тримерни нематични течни кристали – теорията на Онзагер (Onsager) и предложения от Майер и Заупе (Mayer & Saure) метод на молекулно поле. Сравнението на двата подхода показва известно сходство, отразяващо общия им вариационен произход. Това сходство позволява изучаването на критичното поведение на нематичи в рамките на модели с непрекъснати потенциали, отчитайки техния изключен обем (excluded volume). В работата [42] тази идея е приложена за двумерна модел на нематична система. Анализът, базиран на метода Монте Карло, показва, че системата изпитва фазов преход, от типа Березинский–Костерлитц–Таулес, от неподредена фаза към нематична фаза с топологична структура, изградена от дефекти. Детайлно е изследвано критичното поведение в околността на фазовия преход. Получените резултати са сравнени с известни в литературата, изведени посредством използването на полиноми на Лежандър от нисък порядък при описването на между–молекулните взаимодействия.

В работата [50] се разглежда за първи път влиянието на крайната температура върху квантовото критично поведение на модела на Gross–Neveu за взаимодействащи фермионни полета в $2 + 1$ размерности. Този модел има приложение в кондензираната материя и физиката на елементарните частици. Изследванията са проведени в границата на безкраен брой компоненти на полетата, където модела допуска свойството на точно решение. Направен е подробен анализ на скейлинговите свойства и е определено поведението на фермионната маса и на това на свободната енергия в

различните области на фазовата диаграма в околността на нулево температурната критична точка. Получени са нови критични амплитуди. Очаква се тези изследвания да допринесат за разбиране на квантовите критични явления в по реалистични модели.

Работите [53, 58] са посветени на изследването на термодинамичните и структурните свойства на класическа моделна система, описваща далекодействащо дипол-диполно взаимодействие в проста кубична решетка, съставена от диполи. Проучена е възможността за наличието на нематично квадруполно подреждане и е характеризирано критичното поведение на системата. Показано е, че основното състояние на системата е изродено с феромагнитно подреждане. При крайни температури е използван Монте Карло метода за определяне на критичните свойства. Намерено е, че нематично подреждане възниква вследствие на термичните флукутации и че системата изпитва фазов преход от втори род към неподредена фаза. Определена е критичната температура на системата. В работата [55] са изследвани термодинамичните и структурните свойства на някои класически моделни системи, описващи сингулярни (феромагнитно и нематично) взаимодействия между най-близки съседни спинове или течно-кристални молекули в линейна верижка и квадратна решетка. Показано е, че в едномерния случай моделите са в неподредено (парамагнитно или изотропно) състояние при произволна температура. В двумерния случай системите са в неподредено състояние при всякакви температури, но изпитват фазов преход от типа Березинский-Костерлиц-Таулес в квази-подредено състояние при намаляване на температурата на системата.

Магнитни молекули с комплексни обменни взаимодействия

Теоретичното разглеждане на магнитните системи в рамките на спинови модели като този на Хайзенберг невинаги води до акуратни резултати, сравними с експерименталните измервания. В цикъл от работи [61–64, 67, 69, 72, 79, 80, 82, 88, 92, 93, 98, 99], показано е, че отчитането на сложния характер на химичната връзка между магнитните йони води до значително подобрене на теоретичните резултати при някои магнитни молекули. Целта на изследванията е разработване на систематичен метод за определяне физическите свойства на голям набор магнитни молекули.

В серия от три работи [63, 64, 69, 72] подробно са изследвани нисколежащи възбудени състояния на молекулните магнитни системи $A_3Cu_3(PO_4)_4$ ($A = Ca, Sr, Pb$) и Ni_4Mo_{12} посредством обобщен модел на Хайзенберг, който се базира на билинейн обменни взаимодействия не само между близки съседи и същевременно отчита някои специфични магнитни свойства на разглежданите системи, като например тенденцията към формиране на локални спинови състояния на клъстери от магнитни атоми. За целта са въведени допълнителни свободни параметри в хамилтониана, които позволяват аналитично определяне на магнитните характеристики на съединенията. Получените оценки са в добро съгласие с измерените експериментални резултати с помощта на нееластично неутронно разсейване.

В работата [80] са описани с най-големи подробности основите на вариационен метод и спинов модел, разработени от нас с цел интерпретация на магнитното поведение на молекулни магнити, включващи в състава си нетривиална по химичен строеж обменна мостова структура. Математичния подход се базира на теорията на молекулните орбитали и метода на многоконфигурационното самосъгласувано поле. Това свежда многочастичната задача за намирането на основното и възбудените състояния на системата от молекулния магнит до схема на пост-Хартри-Фок за конструиране на съответния вариационен енергетичен спектър. На свой ред, с цел по-ефективно аналитично прилагане на посочения вариационен подход, въвеждаме билинеен спиново подобен модел. Хамилтонианът включва набор от дискретни параметри, чрез които се

възпроизвеждат основните енергийни нива от съответния вариационен спектър. За пълна яснота, общата теория се прилага върху опростен модел на молекулен магнит, съставен от два ефективни магнитни центъра със спин единица. Получен е енергийният му спектър както и възможните нисколежащи магнитни преходи. Всички параметри на модела са получени в явен вид. Това включва представянето им като функция от обменните интеграли на системата. Описаният спинов модел бе приложен успешно при определянето на магнитните свойства на молекуления магнит $\text{Ni}_4\text{Mo}_{12}$, като резултатите бяха публикувани в работата [72]. Теоретичните резултати това съединение са в много добро съгласие с докладваните в литературата експериментални данни за магнитния спектър, намагнитването и магнитната възприемчивост.

В работата [82] е предложен спин-обменен хамилтониан за определяне на магнитното поведение на еднйонните магнити $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]$ и $[(\text{Pc})\text{ErPcN}(\text{C}_4\text{H}_9)_{28}]^{/-}$. Трите съединения представляват Ербий базиран комплекс с много сходна геометрия, т.нар. квадратна антипризма. За разлика от метода на локализираните електрони, разглеждащ $4f$ комплексите в базиса на свободен йон и отчитащи влиянието на кристалното поле пертурбативно, приложението подход разглежда несдвоените валентни електрони като делокализирани, заемащи антисвързващи молекулни орбитали [79]. Тази електрон-орбитална структура свежда влиянието на спин-орбиталните взаимодействия върху крайния енергетичен спектър до минимум. От друга страна, тя определя обменните взаимодействия в съединенията като водеща причина за магнитните им свойства. На тази основа се въвежда и подходящ ефективен спин-обменен модел. Той включва както параметри отчитащи приноса на вътрешно-молекулярните обменни взаимодействия, така и параметрите отчитащи чисто орбиталните приноси на електроните. Моделът бе приложен с успех в два режима: отсъствие и наличие на външно приложено магнитно поле. По-конкретно, изчисленията показват добро съвпадение с експерименталните резултати от литературата за магнитния спектър на еднйонния магнит $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]$, получен чрез нееластична неутронна спектроскопия. Освен това, теоретичните резултати за намагнитването и магнитната възприемчивост в условията на стационарно външно магнитно поле са в добро съгласие с експериментално установените в литературата. В допълнение, моделът дава много близки до експериментално докладваните в литературата стойности на енергейната бариера, необходима да се преодолее, за да се наблюдава релаксация в намагнитването. Тази стойност е получена като следствие от доброто съвпадение между изчисленията и експерименталните данни за магнитната възприемчивост в условията на променливо магнитно поле. За съединенията $[(\text{Pc})\text{ErPcN}(\text{C}_4\text{H}_9)_{28}]^{/-}$, изчисленията за намагнитването и магнитната възприемчивост в режим на постоянно и променливо магнитно поле също демонстрират близост с експериментално установените стойности докладвани в литературата.

В работата [88] е изследван квантовият произход на магнито-структурните корелации в ниско-размерни системи и молекулни магнити. Разгледаните задачи са пряко свързани с определянето на действителния принос на кристално/лигандно поле, обменните, спин-орбиталните и Зееман взаимодействия върху магнитните и спектроскопските свойства на $3d^n$ системи. Една част от изследванията се базират на разработената от нас теоретична рамка [80], базирана на теорията на молекулярните орбити и метода на многоконфигурационното самосъгласувано поле. Тези изследвания включват употребата на полеви метод на ограниченото активно пространство. Той е разработен в съответствие с принципите на теорията на кристалното поле и метода на Хартри-Фок. Този метод разглежда несдвоените електрони като локализирани до голяма степен около металните йони, което го прави полезен при изследвания на $3d^n$ системи ($n = 2, \dots, 5$). За демонстриране неговото приложение, са изследвани магнитните и спектралните свойства на $3d^2$ спин-единица съединението $(\text{C}_6\text{F}_5)_3\text{trenVCNtBu}$. Направените изчисления водят до добро съвпадение с експе-

рименталните данни за намагнитването, магнитната възприемчивост, електронно парамагнитната резонансна спектроскопия и фотолуминесценцията. Получените резултати недвусмислено показват зависимостта на магнитните и спектралните свойства на това съединение от собствена химична структура.

Едно-йонните молекулни магнити, които притежават енергетична бариера, определяща динамиката на магнитния им момент, са сред най-привлекателните наномагнитни системи, както за теоретичите, така и за експериментаторите в съответната научна област. Благодарение на уникалните си анизотропни свойства и фина структура на енергетичния спектър, те продължават да впечатляват и привличат вниманието на изследователите в областта вече повече от две десетилетия. Тези едно-йонни молекулни магнити се нареждат сред едни от най-обещаващите кандидати за проектиране на бъдещите квантови технологии. За изясняването на тези въпроси е публикуван обзор [92] с анализ на постиженията през последните две десетилетия при синтеза на 3d и 4f едно-йонни молекулни магнити, който бе с фокус върху изследванията на едно-йонни молекулни магнити, притежаващи изключително голяма енергетична бариера, бавна магнитна релаксация и висока блокираща температура. Паралелно с това са изучени и описани съответните магнито-структурни зависимости, лежащи в основата на анизотропното им поведение. Дискутирани са и фундаменталните теоретични аспекти, изясняващи сложното поведение на тези наноразмерни магнитни единици. Това включва анализи на ключови понятия като разцепването на енергетичните нива в условията на нулево магнитно поле, анизотропна енергия и квантово тунелиране на намагнитването. Взаимовръзката между всяка една от изброените три характеристики е внимателно проучена и описана в примери, включващи 3d² и 3d⁸ едно-йонни молекулни магнити с различна симетрия на кристалното поле, със съответно V³⁺ и Ni²⁺ метални центрове. От особен интерес за проведените изследвания бе проблемът свързан със съществуването на огромно разцепване при нулево магнитно поле и гигантската магнитна анизотропия в Ni²⁺ комплекси, особено в тези с тригонална бипирамидална геометрия.

Работите [93, 99] обхващат изследвания на фината структура на 3d⁸ метални комплекси с октаедърна, квадратично планарна, тетраедърна, тригонална дву и едно пирамидална, както и планарна такава. Познаването на фината структура на тези системи води до непосредствено определяне на магнитното им поведение, което от своя страна улеснява работата по опитите за тяхното внедряване в практиката. Ето защо, тези изследвания са от особено значение за областта на молекулния магнетизъм. Целта на изследванията е, определяне произхода на съответното разцепване при нулево външно магнитно поле, а ако не съществува такава, да се изучат причините за това. Важни количествени и качествени оценки при изследването на фината структура са намиране на максималната възможна големина на енергетичния процеп между основно състояние и най-високото възбудено такова на съответната фина структура и явния вид на собствените функции описващи тази структура. В работата [98] е представен задълбочен анализ на магнитните свойства в основното състояние на едно-йонния наномагнит mer-[V(ddpd)₂][PF₆]₃ с нетен магнитен момент спин-единица. Посоченото съединение се характеризира с нарушена октаедрична симетрия на кристалното поле, в което металният център V³⁺ е директно координиран от шест азотни йона влизащи в състава на лигандните пръстени на групата ddpd (N, N'-dimethyl-N,N'-dipyridine-2-ylpyridine-2,6-diamine). Фокусът на изследванията е насочен към определянето на фината структура от енергетичния спектър на разглежданото съединение и произтичащите от нея магнитни свойства. Изчисленията проведени в рамките на това изследване се извършват с помощта на самосъгласуван микроскопичен числен метод. Същият е базиран на метода на точна диагонализация и е специално разработен така, че да отчита магнитните свойства на едно-йонни наномагнити

в условията на пълен набор от възможни електронни конфигурации [?]. В разглеждания случай това са пълния брой от $3d^2$ конфигурации. Определен бе и количествения принос от страна на орбиталния момент на $3d$ електроните при намагнитването на системата. Този принос е значителен за изследваната система, като предишните опити за неговото пресмятане от други изследователи в областта, според наличната литература, са неуспешни. Като следствие бе определена и индуцираната от външното магнитно поле енергетична бариера на обръщане на намагнитването отнесено към единица йон. Това от своя страна позволи да се добие представа за динамиката на тоталния магнитен момент на изследвания наноманит в основно състояние.

Свърхпроводимостта и магнетизмът са тясно свързани във високотемпературните свръхпроводници. В работите [90, 91] е изследвана високо-температурна свръхпроводимост в оптимално легирани купрати. Използвайки s - d обменното взаимодействие на Шубин-Кондо-Зинер с Хамилтониана на линейна комбинация на атомни орбитали (LCAO) за CuO_2 равнината. Оценена бе анизотропията на степента на разсейване на електрони и тяхното време на живот, които са наблюдавани чрез фотоемисионна спектроскопия с ъглова резолюция (ARPES). Извършеният качествен анализ показва, че „студените петна“ отговарят на възлови области в свръхпроводящата фаза, където свръхпроводящият процеп е нула, тъй като обменното взаимодействие става нула. От друга страна „горещите петна“ и интензивно разсейване в нормалната фаза отговарят на области с максимален процеп в свръхпроводящата фаза. Доказано е, че разделяема функция, постулирана в подхода на течността на Ферми към нормалната фаза, е същата функция, която е точно пресметната в рамката на s - d подхода в LCAO приближението за равнината на CuO_2 . В този контекст, поне на качествено ниво, свръхпроводящите купрати се описват с един и същи Хамилтониан, приложен към техните свръхпроводящи и нормални свойства. Приносите са: (1) Обяснена е добре известната корелация на Паварини и съавтори [Phys. Rev. Lett. 87, 047003 (2001)] между критичната температура $T_{c,max}$ и формата на Ферми контура на оптимално легирани с дупки купрати. (2) Установено е, че линейната зависимост на омовото съпротивление се дължи на вълново разсейване от термични флуктуации на плътността в слоеста система. (3) В рамките на подхода на s - d обменното взаимодействие с феромагнитен знак е предсказано разпространение на нулев звук в слоести преходни метали перовскити Това разпространение е възможно само в близост до посоките на студените петна на нормалните носители на заряд по Ферми контура.

В работите е [65, 66] проведено изследване на фазовата диаграма на някои феримагнитни вещества на основата на два класически модела на Heisenberg с билинейно взаимодействие. Изчислената са свободната енергия на Ландау, получена чрез прилагане на трансформацията на Hubbard-Stratonovich към началния микроскопски хамилтониан. Основната фаза координатен феримагнетик, като има и метастабилна некоординатна фаза в рамките на разглеждания обменен модел. Числените резултати дават подробно описание на изменението на намагнитването с температурата в зависимост от силата на взаимодействието между подрешетките, както и от разликата на ефективните обменни взаимодействия в двете феромагнитно подредени подрешетки. Получените резултати показват добро качествено съгласие с експерименталните резултати за съединението $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ (при силно взаимодействие) и съединенията ErFe_2 и $\text{GdCo}_{12}\text{B}_6$ при слабо взаимодействие.

Работата [56, 59, 67, 73] изследва динамиката на XY спинова верижка взаимодействаща с квантувана мода на електромагнитно поле. Взаимодействието между квантуваната мода и спиновите магнитни моменти се моделира с модела на Дики. Приложено е приближението на въртящата се вълна и са разгледани границите на неговата приложимост. Показано е, че ако в началото на еволюцията всички възбуждения се съдържат в полето, тогава в режим на голяма честотна раз-

стройка, основния еволюционен ефект се състои в осцилация на възбужденията между модата с нулев импулс на верижката и полето. Съответно, редуцираното фотонно число и намагнитването за възел показват осцилиращо поведение. Предложени са ефективни хамилтониани описващи динамиката на модела за кратки времена, малък брой възбуждения и голяма честотна разстройка. Резонансният случай е разгледан в контекста на фотонна емисия от верижка предварително подготвена във възбудено състояние. В частност, суперрадиантно поведение се проявява в началото на излъчването. В общия случай зависимостта на динамиката на системата от различните експериментално контролируеми параметри е изследвана числено. Направена е оценка на експериментално контролируемите параметри при приложение на същия модел за описание на -агрегати в оптичен резонатор и спинови верижки в микровълнов резонатор.

Манипулирането на състоянията на кубит е важно за квантовата информатика. Това може да се извърши с помощта на външни източници: магнитно поле, електрично поле и др. В работите [77, 78, 85] се разглеждаме въздействието на магнетоните в анизотропна спинова верижка върху кубит, който е поместен достатъчно далеч, за да позволи пълното образуване на солитона в верижката. Това ще минимизира загубата на информацията в солитона. В рамките на тези изследвания се допускат два вида взаимодействия: такова отчитащо взаимодействието на кубита с най-близкия спин и друго, което предполага, че кубита взаимодейства еднакво с всичките спинове във верижката. За целта, се използва приближението на големи по модул спинове, така проблемът се редуцира до изследване на система с две нива за кубита под въздействието на магнитна вълна, която се разпространява по веригата. По този начин можем да контролираме състоянието на кубита чрез вариране параметрите на солитона, например скорост и амплитуда. Показваме по какъв начин може да се контролира състоянието на кубита с помощта на светъл и тъмен солитони. Показано е, например, че кубитът може да бъде обърнат или, в началното си състояние или други състояния, получени като суперпозиция на състоянията и на кубита. Нека отбележим, че за постоянни характерни параметри, когато кубитът взаимодейства с всички спинове във верижката, моделната система с две нива е еквивалентна на известния модел на Rabi. В случай на локални взаимодействия на кубита с най-близкия спин, във верижката е изследвано поведението на кубитът в някои интересни от физическа гледна точка режими. Показано е, че всички гранични случаи се свеждат до познати в литературата точни решими модели. Това ни позволи да получим интересни резултати за поведението на кубита. Нашите резултати могат да бъдат приложени при изследването на редица реални физически системи.

Теоретично моделиране на метали

За правилно описание на сложни физически системи, каквито са металите, е много важно да се познава потенциалът на взаимодействие между атомите. Той трябва да дава правилно описание на основни физически свойства, сред които централно място заемат фононните спектри, еластичните константи, модулите на топлинно разширение и др. Определен успех в това отношение е получаването на потенциал на взаимодействие, който правилно пресъздава симетрията на кристалната решетка и параметрите на елементарната клетка на идеалния кристал. Това, което е много важно за съвременното материалознание и приборостроене, е използването му за изследване на свойствата на даденото вещество в нано-размерната област. Съвременните технологии все повече се насочват към получаването и използването на нанокластери, и възможността да се предсказват и/или обясняват техните свойства е от първостепенно значение. Друга важна страна на изследванията в тази област е ролята на дефектите в такива структури.

Едновременно с това световна тенденция е компютърното моделиране на кристалите на различни елементи. Квантовите особености могат да се разберат само в сравнение с класическите им аналози. Но това е само малка част от значението на компютърното симулиране на структурите, фононните спектри, влиянието на дефектите, и на фазовите преходи и критичното поведение на познатите ни материали, както и предсказването на свойствата и поведението на нови такива, често пъти въобще не съществуващи в природата. Такива изследвания са стъпка напред към разбирането на сложните физически процеси в класически и квантови кристали с дефекти. Компютърното моделиране дава възможност да се проверяват различни хипотези за ролята на отделни видове взаимодействия, както и точността на различни феноменологични модели. Както вече споменахме, потенциалът на взаимодействие между атомите в една система играе ключова роля в компютърното моделиране. Веднага трябва да отбележа, че ерата на двучастичните взаимодействия отдавна отмина и най-използваните потенциали в съвременната литература са такива, които съдържат многочастични взаимодействия. Съществено за тях е, че те вземат под внимание локалната плътност на електроните в изследваната система.

Поставените задачи за разглеждане в част от трудовете са в приоритетното направление материалознание, нови материали и нанотехнологии. Най-общо, те включват компютърно моделиране на материали, така както и определянето на техните структурни, термодинамични и механични свойства. Получените резултати са публикувани в работите [22, 26, 27, 49]. Потенциалното взаимодействие между атомите в една система играе ключова роля в компютърното моделиране в областта на материалознанието. Най-използваните потенциали в литературата са такива съдържащи членове с многочастично взаимодействие, които вземат под внимание локалната плътност на електроните в изследваната система. В гореспоменатите работи се предлагат потенциали за описание на физическите свойства на Al, Ni и подредените сплави Ni-Al [22], така както и на Au [27] в рамките на приближението на силните връзки (tight binding), напасвайки параметрите на функционала на енергията към пълната енергия, получена от първи принципи (first principles) като функция на обема. Получените потенциали бяха използвани за изчисляването на обемния модул, еластичните константи, енергия за образуване на ваканция и повърхностната енергия. Теоретичните предсказания показват добро съгласие с експерименталните измервания.

Използван е методът на молекулната динамика за определянето на температурната зависимост на редица физически величини [22, 26, 27, 49]: коефициент за топлинно разширение, средноквадратично отместване, плътност на състоянията на фононите и фононните дисперсии. Получените резултати са в добро съгласие с експерименталните данни. Те могат да бъдат използвани за симулации при определяне на физическите свойства на материалите, като пример можем да посочим: епитаксиално израстване, повърхностна дифузия, наноструктури и различни термични свойства. Остава да отбележа, че предложените от нас потенциали са значително по-добри от предшестващите, макар че са получени в рамките на същото приближение.

Работата [26] в голямата си част е посветена на изследването посредством компютърни симулации на алуминиеви наноматрици съдържащи зърна с икосаедрична (icosahedron: двадесетстенник) структура с различни размери. Нашите изчисления на двучастичната функция на разпределение, показват, че системата има необичайна структура. Определянето на подреждането на атомите в наносистемата е извършено с помощта на метода на Вороной. Намерено е, че системата има поликристална структура с различни области с локално подреждане. Атомите в непосредствена близост до зърното образуват обвивки, следвайки икосаедричната структура. Този резултат е потвърден и от визуализирането на последните конфигурации получени от молекулна динамика при крайна температура. Следва да се отбележи, че при освобождаване на наночастиците

системата се преподрежда в обичайната за алуминий структура. Установено обемния модул на наносистемата намалява с нарастване на размера на зърното.

В работата [37] е предложен нов потенциал, подходящ за описание на физическите свойства на желязо (Fe) в рамките на така наречения „Embedded Atom Method“. Параметрите на функционала на енергията се напасват към голям брой физични характеристики на желязо, получени експериментално или от първи принципи за обемно–центрирана и стенно–центрирана кубични решетки. Получените потенциали бяха използвани за изчисляване на обемния модул, еластичните константи, повърхностната енергия и енергия за образуване на ваканция. Теоретичните предсказания показват доста добро съгласие с експерименталните резултати на кохесивна енергия, повърхностни енергии и други.

Качествата на предложения потенциал бяха проверени също така и чрез използването му в съчетание с метода на молекулната динамика за определяне температурната зависимост на редица физически величини [37]: коефициент за топлинно разширение, средно–квадратично отместване, плътност на състоянията на фононите и фононните дисперсии. Получените резултати са в добро съгласие с експерименталните данни. Нека отбележа, че предложеният от нас потенциал е значително по–добър от предшестващите, макар че всички са получени в рамките на едно и също приближение. Този потенциал може да бъде използван за симулации при определяне на физическите свойства на материалите. Като пример можем да посочим: епитаксиално израстване, повърхностна дифузия, наноструктури и различни термични свойства.

Построеният потенциал бе използван в работите [37] и [44] за изследване на дифузията на атоми и вакансии на повърхността (100) на обемно–центрирана кубична решетка при различни температури. Бяха определени миграционните енергии на три механизма на дифузия и бе направено сравнение с наличните експериментални данни. Получените резултати показват, че енергетично най–изгодна е диагоналната обменна дифузия и че съответната миграционна енергия получена чрез компютърно моделиране е доста близка до експерименталната стойност. Показано е също, че приносът на ваканционната дифузия в явленията на пренос на маса е много съществен.

В работата [39] потенциалът е използван за изчисляване на плътността на състоянията на фононите на обемно–центрирана и стенно–центрирана кубични решетки. Използван е методът на молекулната динамика. Определени са и повърхнинните фононни спектри на повърхностите (100) на тези структури. Получените резултати са в добро съгласие с експерименталните резултати. Обсъдено е влиянието на повърхностните ефекти, тъй като те играят особено важна роля при формирането и определянето на физическите свойства на наноструктури. През последното десетилетие и благодарение на големите възможности на свръхмалките компютри, изучаването на ефекта на магнитните свойства върху структурните и механичните характеристики на материалите се радва на голям интерес, като един по най–използваните потенциали, отчитащи междуатомни взаимодействия е именно този предложен в нашата работа [37]. Такъв тип изследвания ще отвори пътя пред развитието на нови методи и създаване на нов или усъвършенстване на съществуващ специализиран софтуер за моделиране на реални материали. Тези изследвания са стъпка напред към разбирането на сложните физически процеси в класически и квантови кристали под влиянието на конкуриращи се взаимодействия в кристала. Първите ни резултати по тази тематика са публикувани в работите [84, 95]. В резюме, с помощта на софтуерния пакет LAMMPS за изследване на свойствата на материалите е извършено компютърно моделиране на процеса на взаимната термализация на спиновата и решетъчната подсистеми в обемноцентрирана Fe решетка при 300 K. Хамилтонианът на системата включва механичен потенциал от работата [37] и обменно магнитно взаимодействие от типа на Heisenberg. Наблюдава се много

добро съгласие между изчисления и експериментално определения закон на дисперсия на фононите. То се отнася към всички кристалографски направления и малки до средни значения на вълновото число. Разликата между изчисленията на дисперсионната крива за фононите и експерименталните данни, наблюдавана в края на зоните, се дължи на анхармоничните ефекти. Наблюдава се изразено влияние от магноните върху фононния спектър в желязото.

Теоретично изследване на ефекта на примеси върху фазовото поведение на липидни мембрани

Силовото поле Slipids (Stockholm lipids) е подходящо за описание на физико-химичните свойства на биологични мембрани, съставени от фосфолипиди при стайна температура. Досега неговата точност да възпроизвежда поведението на термодинамичните и структурните величини на мембраните при ниски температури все още не е тествана в достатъчно подробности. В работите [52, 57, 83, 96, 97] са изчислени някои характерни величини на двоен слой от SOPC (1-stearoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine) с помощта на отворения пакет за молекулна динамика GROMACS в съчетание със силовото поле Slipids. Първоначалната конфигурация на системата SOPC, съставена от 128 липидни молекули, разпределени равномерно във всеки монослой и достатъчен брой водни молекули, беше генерирана с помощта на CHARMM-GUI. Атомните молекулно-динамични (MD) симулации бяха извършени при температури в интервала 272 – 271 K to 283 K. По силата на статистически анализ на траекториите, са изчислени основните структурни параметри на липидните молекули и термодинамичните величини, характеризиращи фазовото поведение на двуслоя. Резултатите от изследванията са сравнени с наличните експериментални данни, както и с теоретични предсказания. Установено е, че използваното силово поле описва достатъчно добре както структурното поведение на липидите при ниските температури и фазовото поведение на липида. При смесването на липида с холестерол, който има втвърдяващ ефект върху липидната мембрана, са проведени изследвания с помощта на молекулна динамика. Използвани са три различни концентрации – 10 %, 30 % и 50 %. Анализ на пресметнатите термодинамични, структурни и механични свойства показва, че температурата на фазовия преход намалява с повишаването на концентрацията на примеса и че 50 % холестерол размива температурата на прехода. Тези изследвания са в добро съгласие с публикувани е литературата експериментални данни, някои от които са публикувани с мое участие в работите [68, 70, 71, 75, 83, 86, 87, 89] върху влиянието на органични и неорганични примеси върху физико-химичните свойства на липидните мембрани. Ще отбележа, че благодарение на моята експертиза по теорията на фазовите преходи, видима от публикуваната глава [52], моето участие в тези работи е свързано с теоретичния анализ и интерпретация на експерименталните данни както и редактирането на текстовете на статиите.

Проблеми свързани с неекстензивната статистика на Tsallis

В трудовете [24, 33] се разглеждат някои проблеми свързани с прилагането на различните методи за пресмятане на термодинамични величини в рамките на неекстензивната статистическа физика на Tsallis при равновесното топлинно излъчване на абсолютно черно тяло. Тези проблеми са обект на критично обсъждане в литературата. Получени са аналитични изрази за термодинамичните потенциали чрез специални функции на Wright и са изведени полезни асимптотики за тях. Тези се изписват в достатъчно проста и нагледна форма.

Линейна и нелинейна оптика на спектрално-широки импулси

Като участник в проект ELI ERIC BG, задачата ми е да извършвам теоретични изследвания за разработването на механизмите лежащи в основата на получаването на „екстремна светлина“. За спектрално широки импулси, на разстояния от няколко дифракционни дължини, дифракцията е от типа на Френел и еволюцията им може да бъде описана правилно в рамката на добре познатия параксиално еволюционно уравнение. Технологията, създадена през 1985 г за усилване на лазерния импулс чрез чирпиране, даде силен тласък на развитието на лазерната оптика и изграждането на фемтосекундни (fs) лазерни съоръжения, произвеждащи полета с висок интензитет от порядъка на $10^{15} - 10^{21} \text{ W/cm}^2$. Продължителността на импулса бе бързо съкратена от пикосекунди до 5 – 6 fs, които имат спектрално широк импулс. Динамиката на линейното и нелинейното разпространение на широкополосните импулси е много различна от техните спектрално тесни аналози. Обзорната работа [100] представя критичен преглед на постиженията в тази област и разглежда подходящия теоретичен подход за изследване на еволюцията на импулса. Освен това хвърля светлина върху различните дифракционни режими, присъщи както на спектрално тесните, така и на спектрално широките лазерни импулси и ги сравнява, за разкриване на основните различия. Използвайки този метод, в ще бъде разгледано влиянието на дисперсията и нелинейността върху разпространението на лазерен импулс в изотропна среда.

София, 7 юни 2024 г.

Подпис:

Справка за основните резултати от научните трудове

на доцент дфн Х. Шамати

1. Разработен е метод за анализ на крайно–размерните ефекти в слоеве. Получени са аналитични резултати за свободната енергия и други термодинамични величини в рамките на средно–сферичен модел при произволна размерност и за различни гранични условия. Пресметнати са амплитуди на Казимир.
2. Изведено е крайно–размерното скейлингово поведение на редица динамични величини в критични филми с периодични и свободни гранични условия посредством метода на ренорм група. Получени са явни изрази за скейлинговите функции на крайно–размерната възприемчивост и локални възприемчивости за модела на Гинзбург–Ландау до $\varepsilon^{3/2}$ (ε е отклонението от горната критична размерност).
3. Изведени са скейлинговите закони за динамични корелационни функции на критична случайно разредена крайна магнитна система с периодични гранични условия чрез метода на ренорм груповата теория на полето. Теоретичният и численият анализ на модела на Гинзбург–Ландау със случайна критична температура до най–ниския порядък по отклонението от горната критична размерност показва, че примесите нямат значително влияние върху поведението на релаксационното време. Тази величина има поведение, подобно на това на модела без примеси.
4. Предсказано е скейлинговото поведение на редица термодинамични функции, като свободната енергия и възприемчивостта в класическата и квантовата граници на квантовия модел на Гинзбург–Ландау и квантови ротори в сферичната граница с периодични гранични условия. Проверени са различни скейлингови хипотези, включително и наши, в теорията на крайно–размерен скейлинг и е изследвано взаимното влияние на квантовите и класическите флуктуации в различни геометрии.
5. Обобщен е за системи с далекодействие и неподредени системи методът на Брезен и Зин–Жустен (Brézin & Zinn–Justin) за изследване на крайно–размерни критични ефекти. Показано е за системи с далекодействие, използвайки идеите на метода ренорм група, че скейлинговите функции зависят от две скейлингови променливи за разлика от стандартния крайно–размерен скейлинг. Нашите предсказания са проверени в рамките на модела на Гинзбург–Ландау. Показана е липсата на самоусреднение в неподредените модели XY и на Хейзенберг (в рамките на модела на Ландау–Гинзбург със случайна критична температура) до най–ниския порядък по $\sqrt{\varepsilon}$ (ε е отклонението от горната критична размерност).
6. Разработен е математически подход, базиран на асимптотични свойства на обобщените функции на Митаг–Лефлер (Mittag–Leffler), за пресмятане на широк клас от многомерни суми, които се срещат в редица физически задачи (анизотропия, далекодействие и квантови ефекти) в теорията на крайно–размерен скейлинг в различни асимптотични режими.
7. Построени са фазовите диаграми на разредени решетъчни двумерни модели: дву–компонентен ротатор и модела XY, и тримерни модели XY и Хейзенберг с подвижни примеси. Нашият анализ на термодинамиката на тези модели показва, че родът на фазовия преход се сменя от втори за тримерните модели и Березински–Костерлитц–Таулес (Berezinskii–Kosterlitz–Thouless) за двумерните към първи, когато концентрацията на примесите нараства. Показано е, че температурата на фазовия преход намалява.
8. Получена е фазовата диаграма на двумерна и тримерна обобщена версия на решетъчен модел XY, където флуктуациите извън равнината ху се контролират от специфичен параметър

p . Нашето изследване на поведението на редица термодинамични функции показва, че характерът на фазовия преход силно се влияе от параметъра p . При $p \geq 12$ за тримерните решетки и при $p \gtrsim 6$ за двумерните фазовият преход е от първи род, докато при по-малки стойности на p той е еквивалентен на този на оригиналния модел XY. Температурата на фазовия преход намалява като функция на p за всяка размерност на решетката.

9. Разгледано е за първи път влиянието на температурата върху квантовото критично поведение на модела на Gross–Neveu за взаимодействащи фермионни полета в $2 + 1$ размерности. Този модел има приложение в кондензираната материя и физиката на елементарните частици. Направен е подробен анализ на скейлинговите свойства и е определено поведението на фермионната маса и на това на свободната енергия в различните области на фазовата диаграма в околността на нулево температурната критична точка. Получени са нови критични амплитуди.
10. Разработен е обобщен вариационен пост Хартри-Фок метод на базата на теорията на орбиталните молекули и е предложен спинов модел с делокализирани спинове за изследване на магнитните свойства на молекулни магнити в нетривиална по химичен строеж обменна мостова структура. Методът позволява да се получат основните характеристики на молекулните магнити. В случая съединението $\text{Ni}_4\text{Mo}_{12}$, моделът разкрива причината за експериментално наблюдавана разтегната стъпаловидна структура на намагнитването при високо външно магнитно поле.
11. Предложен е спиново-обменен хамилтониан за определянето на поведението на някои ербий базираните магнитни съединения с почти идентична кристална структура – $\text{Na}_9[\text{Er}(\text{W}_5\text{O}_{18})_2]$ и $[(\text{Pc})\text{ErPcN}(\text{C}_4\text{H}_9)_{28}]^{1-}$. Получените магнитните спектри на тези съединения показват добро съгласие с експерименталните резултати за енергийната бариера и възприемчивостта.
12. Разработен е метод в на базата на ограниченото активно пространство в съответствие с принципите на теорията на кристалното поле и метода на Хартри-ФОК за изследване на $3d^n$ системи ($n = 2, \dots, 5$). За съединението $\text{C}_6\text{F}_5)_3\text{trenVCNiBu}$, методът дава добро съвпадение с експерименталните данни за намагнитването, магнитна възприемчивост, електронно парамагнитната резонансна спектроскопия и фотолуминесценцията.
13. Определена е фината структура на енергийна спектър на $3d^2$ и $3d^8$ метални комплекси с различни кристални структури. Намерена е големината на процепа на между основното състояние и най-високото възбудено такова. Този процеп е особено важна величина за прилагане на молекулните магнити.
14. Показано е, че магнитни солитони могат да се използват за кохерентен контрол на състоянието на кубит, намиращ се на верига на Heisenberg. При големи магнитни моменти е изведен Хамилтониан за описание на взаимодействието между солитон и кубит като система с две нива с матрични елементи зависещи от параметрите на солитона. Получени са важни за система физически величини в зависимост от характера на солитона.
15. Разработени са нови многочастични потенциали за описание на физическите свойства на Al, Ni и на подредените сплави Ni–Al, така както и на Au в рамките на приближението на силните връзки (tight binding). Параметрите на потенциалите се напасват към данни на енергията от първи принципи. Получените потенциали бяха използвани за изчисляването на редица термодинамични и структурни величини. Теоретичните предсказания показват добро съгласие с експерименталните измервания. Показано е, че потенциалите могат да се използват за изследване на физическите свойства на различните фази на гореспоменатите материали. По-

тенциалът за алуминий е използван за изследване на свойствата на алуминиеви наноматрици.

16. Получен е нов многочастичен потенциал, подходящ за описание на физическите свойства на желязо в рамките на „Embedded Atom Method“. Параметрите на потенциала са получени чрез напасване към резултати, на редица физически характеристики, от експерименти и стойности от първи принципи за обемно–центрирана и стенно–центрирана кубични решетки. Показано е, потенциалът възпроизвежда с голяма точност известните в литературата експериментални резултати за двете фази. Потенциалът е използван за предсказване на редица физически процеси свързани с желязо.
17. Показано е, че силовото поле Slipids, описващо взаимодействието между липидни молекули и холестерол дава добри резултати, сравними с експерименталните измервания при използването му за моделирането на ефекта на холестерол върху разтвор от SOPC липидите. В частност, показано е, че температурата на фазовия преход от гел към течна подредена фаза намалява с повишаване на концентрацията на холестерол и се размива при високо концентрации.

София, 7 юни 2024 г.

Подпис:

Литература

- [1] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Long-range order of an exactly solvable model of a quantum antiferromagnet,” *phys. stat. sol. (b)*, vol. 174, pp. 505–512, 1992.
- [2] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Long-range order in a quantum model of structural phase transition.” Preprint E17–92–565, JINR, Dubna, Russia, 1992. (10 pp).
- [3] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Symmetry breaking and long-range order: An n-component model of a structural phase transition,” *Phys. Rev. B*, vol. 49, pp. 4311–4314, 1994.
- [4] H. Chamati, “Tricritical Behaviour in a Simple Model of an Itinerant Antiferromagnet,” *phys. stat. sol. (b)*, vol. 182, pp. 189–199, 1994.
- [5] H. Chamati, “ $T = 0$ finite-size scaling for a quantum system with long-range interaction,” *Physica A*, vol. 212, pp. 357–368, 1994. [Preprint IC/94/103, ICTP, Trieste, Italy; (17 pp)].
- [6] H. Chamati, *Long-range order in some exactly solvable quantum models*. PhD Thesis, Institute of Solid State Physics, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 1994. (in Bulgarian).
- [7] H. Chamati and N. S. Tonchev, “On the finite-size shift of the critical temperature,” in *Proceedings of the 8th ISCMP, “Electronics, Optoelectronics and Magnetic Thin Films”, Varna, Bulgaria 18th–23rd Sep. 1994* (J. M. Marshall, N. Kirov, and A. Vavrek, eds.), (Tauten, Somerset, England), pp. 728–731, Research Studies, 1995.
- [8] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Finite-Size Shift of the Critical Temperature in the Spherical Model,” *J. Stat. Phys.*, vol. 83, pp. 1211–1218, 1996.
- [9] H. Chamati, D. M. Danchev, E. S. Pisanova, and N. S. Tonchev, “Low-temperature regimes and finite-size scaling in a quantum spherical model.” Preprint IC/97/82, ICTP, Trieste, Italy; (37 pp), 1997.
- [10] H. Chamati, E. S. Pisanova, and N. S. Tonchev, “Theory of a spherical-quantum-rotors model: Low-temperature regime and finite-size scaling,” *Phys. Rev. B*, vol. 57, pp. 5798–5811, 1998.
- [11] H. Chamati, D. M. Danchev, and N. S. Tonchev, “Finite-size scaling properties and Casimir forces in an exactly solvable quantum statistical-mechanical model,” *J. Theor. App. Mech.*, vol. 28, pp. 78–87, 1998.
- [12] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Finite-size scaling investigations in the quantum φ^4 -model with long-range interaction,” *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 33, pp. 873–890, 2000.
- [13] H. Chamati, D. M. Danchev, and N. S. Tonchev, “Casimir amplitudes in a quantum spherical model with long-range interaction,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 14, pp. 307–316, 2000.
- [14] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Exact results for some Madelung-type constants in the finite-size scaling theory,” *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 33, pp. L167–L170, 2000.
- [15] H. Chamati, N. Tonchev, and D. Danchev, “Some new exact critical-point amplitudes,” *Phys. Part. Nucl.*, vol. 31, no. 7b, pp. 170–175, 2000.

- [16] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Scaling behavior for finite $O(n)$ systems with long-range interaction,” *Phys. Rev. E*, vol. 63, p. 026103, 2001.
- [17] H. Chamati and D. M. Danchev, “Casimir amplitudes in a ferromagnetic model with long-range interaction,” in *Proceedings of the 11th ISCMP, “Materials for information technology in the new millennium”, Varna, Bulgaria, 3rd–8th Sep. 2000* (J. Marshall, A. Petrov, A. Vavrek, D. Nesheva, D. Dimova-Malinovska, and J. Maud, eds.), (Bath, U.K.), pp. 400–403, Bookcraft, 2001.
- [18] H. Chamati, E. Korutcheva, and N. S. Tonchev, “On the finite-size scaling in disordered systems.” Preprint IC/2001/093, ICTP, Trieste, Italy, 2001. (13 pp).
- [19] H. Chamati, “Finite-size scaling in systems with long-range interaction,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 24, pp. 241–249, 2001.
- [20] H. Chamati, E. Korutcheva, and N. S. Tonchev, “Finite-size scaling in disordered systems,” *Phys. Rev. E*, vol. 65, p. 026129, 2002.
- [21] H. Chamati and D. M. Dantchev, “Renormalization group treatment of the scaling properties of finite systems with subleading long-range interaction,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 26, pp. 89–99, 2002.
- [22] N. I. Papanicolaou, H. Chamati, G. A. Evangelakis, and D. A. Papaconstantopoulos, “Second-moment interatomic potential for Al, Ni and Ni–Al alloys, and molecular dynamics application,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 27, pp. 191–198, 2003.
- [23] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Critical behavior of systems with long-range interaction in restricted geometry,” *Mod. Phys. Lett. B*, vol. 17, pp. 1187–1205, 2003.
- [24] H. Chamati, A. Djankova, and N. Tonchev, “Black-body radiation in Tsallis statistics.” Preprint IC/2004/26, ICTP, Trieste, Italy, 2004. (12 pp).
- [25] H. Chamati and D. M. Dantchev, “Casimir force, excess free energy and C functions in $O(n)$ systems with long-range interaction.” Preprint IC/2004/32, ICTP, Trieste, Italy., 2004. (29 pp).
- [26] H. Chamati, M. S. Stoycheva, and G. A. Evangelakis, “Immersed nano-sized Al dispersoids in an Al matrix: effects on the structural and mechanical properties by molecular dynamics simulations,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 16, pp. 5031–5042, 2004.
- [27] H. Chamati and N. I. Papanicolaou, “Second-moment interatomic potential for gold and its application to molecular-dynamics simulations,” *J. Phys.: Condens. Matter*, vol. 16, pp. 8399–8407, 2004.
- [28] H. Chamati and D. M. Dantchev, “Critical Casimir forces for $O(n)$ systems with long-range interaction in the spherical limit,” *Phys. Rev. E*, vol. 70, p. 066106, 2004.
- [29] H. Chamati and S. Romano, “Classical Heisenberg lattice-gas model: Thermodynamics and phase diagrams,” *Phys. Rev. B*, vol. 72, p. 064424, 2005.
- [30] H. Chamati and S. Romano, “Two-dimensional lattice gas models with extremely anisotropic spin interactions,” *Phys. Rev. B*, vol. 72, p. 064444, 2005.

- [31] H. Chamati, S. Romano, L. Mól, and A. R. Pereira, “Three-dimensional generalized xy models: A Monte Carlo study,” *Europhys. Lett.*, vol. 72, pp. 62–68, 2005.
- [32] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Generalized Mittag-Leffler functions in the theory of finite-size scaling for systems with strong anisotropy and/or long-range interaction,” *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 39, pp. 469–478, 2006.
- [33] H. Chamati, A. Djankova, and N. Tonchev, “On the application of nonextensive statistical mechanics to the black-body radiation,” *Physica A*, vol. 360, pp. 297–303, 2006.
- [34] L. Mól, A. R. Pereira, H. Chamati, and S. Romano, “Monte Carlo study of 2D generalized XY-models,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 50, pp. 541–548, 2006.
- [35] H. Chamati and E. Korutcheva, “Relaxation time in confined disordered systems.” Preprint IC/2006/033, ICTP, Trieste, Italy, 2006. (11 pp).
- [36] H. Chamati and S. Romano, “Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition in two-dimensional lattice gas models,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 184424, 2006.
- [37] H. Chamati, N. Papanicolaou, Y. Mishin, and D. Papaconstantopoulos, “Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe(100),” *Surf. Sci.*, vol. 600, pp. 1793–1803, 2006.
- [38] H. Chamati and S. Romano, “Phase transitions in three dimensional generalized xy models,” *Eur. Phys. J B*, vol. 54, pp. 249–254, 2006.
- [39] H. Chamati and N. Papanicolaou, “Phonon density of states of iron from molecular dynamics simulations,” *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, vol. 9, pp. 159–161, 2007.
- [40] H. Chamati and S. Romano, “First-order phase transitions in classical lattice gas spin models,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 184413, 2007.
- [41] H. Chamati and E. Korutcheva, “Critical dynamics in confined systems with quenched random impurities,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 184416, 2008.
- [42] H. Chamati and S. Romano, “Topological transitions in two-dimensional lattice models of liquid crystals,” *Phys. Rev. E*, vol. 77, p. 051704, 2008.
- [43] H. Chamati, “Finite-size effects in the spherical model of finite thickness,” *J. Phys. A: Math. Theor.*, vol. 41, p. 375002, 2008.
- [44] N. Papanicolaou and H. Chamati, “Diffusion of a vacancy on Fe(1 0 0): A molecular-dynamics study,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 44, pp. 1366–1370, 2009.
- [45] H. W. Diehl and H. Chamati, “Dynamic critical behavior of model a in films: Zero-mode boundary conditions and expansion near four dimensions,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 104301, 2009.
- [46] H. Chamati and N. S. Tonchev, “Comment on ‘quantum critical paraelectrics and the casimir effect in time’.” ArXiv eprints, 2009.
- [47] H. Chamati, *Effects of Interaction and Anisotropy on the Critical Behavior of Finite-Size Systems*. DSc Thesis, Institute of Solid State Physics, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulgaria, 2010.

- [48] H. Chamati and S. Romano, "Interaction anisotropy and random impurities effects on the critical behaviour of ferromagnets," *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 253, p. 012011, 2010.
- [49] H. Chamati, "Molecular dynamics study of the thermal properties of nickel," *J. Mater. Sci. Tech.*, 2011. At press.
- [50] H. Chamati and N. S. Tonchev, *Quantum critical scaling and the Gross–Neveu model in 2+1 dimensions*, EPL (Europhysics Letters) **95** (2011) 40005; 6 pages.
- [51] H. Chamati and K. Gaminchev, *Crystallization of nickel nanoclusters by molecular dynamics*, J. Phys. Conf. Ser. **398** (2012) 012042.
- [52] H. Chamati, *Theory of phase transitions: From magnets to biomembranes*; to appear in *Advances in Planar Lipid Bilayers and Liposomes*, **17** (2013); (**Invited Chapter**).
- [53] H. Chamati and S. Romano, *Nematic order by thermal disorder in a three-dimensional lattice-spin model with dipolar-like interactions*, Phys. Rev. E **90** (2014) 022506, 10 pages.
- [54] K. Gaminchev and H. Chamati, *Dynamic stability of Fe under high pressure*, J. Phys.: Conf. Ser. **558** (2014) 012013; 7 pages.
- [55] H. Chamati and S. Romano, *Classical lattice spin models involving singular interactions isotropic in spin space*, Phys. Rev. E **92** (2015) 012135, 14 pages.
- [56] H. Tonchev, A. Donkov and H. Chamati, *Interaction of a single mode field cavity with the 1D XY model: Energy spectrum*, J. Phys.: Conf. Ser. **682** (2016) 012032.
- [57] H. Chamati, R. Trobec and J.I. Pavlič, *Peculiarities in the study of pre-formed DSPC lipid vesicles by coarse-grain molecular dynamics*, *Advances in Biomembranes and Lipid Self-Assembly* **23** (2016) 169.
- [58] H. Chamati and S. Romano, *Nematic order in a simple-cubic lattice-spin model with full-ranged dipolar interactions*, Phys. Rev. E **93** (2016) 052147.
- [59] H. Tonchev, A. Donkov and H. Chamati, *Energy spectra of a spin- $\frac{1}{2}$ XY spin molecule interacting with a single mode field cavity: Numerical study*, J. Phys.: Conf. Ser. **764** (2016) 012017.
- [60] Z. Usatenko, P. Kuterba, H. Chamati and J. Halun, *Investigation of ring polymers in confined geometries*, J. Phys.: Conf. Ser. **794** (2017) 012002.
- [61] M. Georgiev and H. Chamati, *Spin multipole moments as collective quantum phenomena*, J. Phys.: Conf. Ser. **794** (2017) 012026.
- [62] Z. Usatenko, P. Kuterba, H. Chamati and P. Romeis, *Linear and ring polymers in confined geometries*, EPJ Special Topics **226** (2017) 651.
- [63] M. Georgiev and H. Chamati, *Magnetic excitations in the trimeric compounds $A_3Cu_3(PO_4)_4$ ($A = Ca, Sr, Pb$)*, C.R. Acad. Bulg. Sci. **72** (2019) 29.
- [64] M. Georgiev and H. Chamati, *Magnetic Exchange in Spin Clusters*, AIP Conf. Proc. **2075** (2019) 020004.

- [65] H. Chamati and D. Shopova, *Ferrimagnetism in a Two-sublattice Bilinearly Coupled Heisenberg Model*, AIP Conf. Proc. **2075** (2019) 020007.
- [66] H. Chamati and D. Shopova, *Ferrimagnetism in a system of two antiferromagnetically coupled Heisenberg models*, J. Phys. Conf. Ser. **1186** (2019) 012002.
- [67] H. Tonchev, A. A. Donkov and H. Chamati, *Energy spectra of a spin- $\frac{1}{2}$ XY spin molecule interacting with a single mode field cavity*, J. Phys. Conf. Ser. **1186** (2019) 012022.
- [68] J. Genova, Z. Slavkova, H. Chamati and M. Petrov, *Gel – liquid crystal phase transition in dry and hydrated SOPC phospholipid studied by Differential Scanning Calorimetry*, Phase Transit. **92** (2019) 323-333.
- [69] M. Georgiev and H. Chamati, *Magnetic excitations in molecular magnets with complex bridges: The tetrahedral molecule Ni_4Mo_{12}* , Eur. Phys. J. B **92** (2019) 93.
- [70] J. Genova, H. Chamati, Z. Slavkova and M. Petrov, *Differential Scanning Calorimetric Study of the Effect of Cholesterol on the Thermotropic Phase Behavior of the Phospholipid 1-Stearoyl-2-Oleoyl-sn-Glycero-3-Phosphocholine*, J. Surfact. Deterg. **22** (2019) 1229.
- [71] J. Genova, H. Chamati, M. Petrov, *Physico-chemical characterizations of lipid membranes in presence of cholesterol*, Adv. Biomembr. Lipid Self-Assem. **31** (2020) 1.
- [72] M. Georgiev and H. Chamati, *Magnetization steps in the molecular magnet Ni_4Mo_{12} revealed by complex exchange bridges*, Phys. Rev. B. **101** (2020) 094427.
- [73] S. Varbev, I. Boradjiev, H. Tonchev and H. Chamati, *Dynamics of a periodic XY chain coupled to a photon mode*, Eur. Phys. J. B **93** (2020) 131.
- [74] Z. Slavkova and J. Genova, H. Chamati, M. Koroleva and D. Yancheva, *Influence of hydrophobic Au nanoparticles on SOPC lipid model systems*, Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp. **603** (2020) 125090.
- [75] J. Genova, H. Chamati and M. Petrov, *Study of SOPC with embedded pristine and amide-functionalized single wall carbon nanotubes by DSC and FT-IR spectroscopy*, Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp. **603** (2020) 125261.
- [76] Z. Slavkova, N. Drinova, H. Chamati and J. Genova, *Influence of sucrose on the phase behaviour of phospholipid model systems*, J. Phys. Conf. Ser. **1762** (2021) 012012.
- [77] S. Varbev, I. Boradjiev and H. Chamati, *Single-photon generation of entangled triplet state in an atomic spin dimer*, J. Phys. Conf. Ser. **1762** (2021) 012015.
- [78] S. Varbev, I. Boradjiev, R. Kamburova and H. Chamati, *Interaction of solitons with a qubit in an anisotropic Heisenberg spin chain with first and second-neighbor interactions*, J. Phys. Conf. Ser. **1762** (2021) 012018.
- [79] M. Georgiev and H. Chamati, *Origin of the magnetic exchange in insulators: Localized vs. delocalized electrons*, J. Phys. Conf. Ser. **1762** (2021) 012019.

- [80] M. Georgiev and H. Chamati, *Molecular magnetism in the multi-configurational self-consistent field method*, J. Phys. Condens. Matter **33** (2021) 075803.
- [81] H. Chamati, *Scaling behavior of confined $O(n)$ systems involving long-range interaction*, J. Theor. Appl. Mech. (Bulgaria) **51** (2021) 108.
- [82] M. Georgiev and H. Chamati, *An exchange mechanism for the magnetic behavior of Er^{3+} complexes*, Molecules **26** (2021) 4922.
- [83] N. Ivanova, J. Genova and H. Chamati, *Physical properties of SOPC lipid membranes containing cholesterol by molecular dynamics simulation*, Adv. Biomembr. Lipid Self-Assem. **34** (2021) 1.
- [84] E.L. Angelova and H. Chamati, *Dynamic simulation of energy spectrum of phonons in magnetic bcc iron*, C. R. Acad. Bulg. Sci. **75** (2022) 197.
- [85] S. Varbev, I. Boradjiev, R. Kamburova, and H. Chamati, *Control of a qubit state by a soliton propagating through a Heisenberg spin chain*, Phys. Rev. E. **105** (2022) 034207.
- [86] Z. Slavkova, J. Genova, H. Chamati, V. Boev and D. Yancheva, *Silver nanoparticles synthesis and their effect on the SOPC lipid structure*, J. Phys. Conf. Ser. **2240** (2022) 012019.
- [87] P. Budime Santhosh, J. Genova and H. Chamati, *Green synthesis of gold nanoparticles: An eco-friendly approach*, Chemistry **4** (2022) 345.
- [88] M. Georgiev and H. Chamati, *Magneto-structural dependencies in $3d^2$ systems : The trigonal bipyramidal V^{3+} complex*, Phys. Status Solidi B **259** (2022) 2100645.
- [89] P. Budime Santhosh, J. Genova, Z. Slavkova and H. Chamati, *Influence of melatonin on the structural and thermal properties of SOPC lipid membranes*, Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp. **647** (2022) 129081.
- [90] T.M. Mishonov, N.I. Zahariev, H. Chamati and A.M. Varonov, *Possible zero sound in layered perovskites with ferromagnetic s-d exchange interaction*, SN Appl. Sci. **4** (2022) 228.
- [91] T.M. Mishonov, N.I. Zahariev, H. Chamati and A.M. Varonov, *Hot spots along the Fermi contour of high- T_c cuprates analyzed by s-d exchange interaction*, SN Appl. Sci. **4** (2022) 242.
- [92] M. Georgiev and H. Chamati, *Single-ion magnets with giant magnetic anisotropy and zero-field splitting*, ACS Omega **7** (2022) 42664.
- [93] M. Georgiev and H. Chamati, *Fine structure and the huge zero-field splitting in Ni^{2+} complexes*, Molecules **27** (2022) 8887.
- [94] E. Korutcheva, K. Korutchev, S. N. Santalla, J. Rodríguez-Laguna and H. Chamati, *The Restricted Boltzmann Machine Ansatz through Adiabatic Routes*, J. Phys. Conf. Ser. **2436** (2023) 012001.
- [95] E. Angelova and H. Chamati, *Dynamic simulation of the quasiparticle excitations spectra in the magnetic bcc iron*, J. Phys. Conf. Ser. **2436** (2023) 012011.
- [96] N. Ivanova and H. Chamati, *Physical properties of phospholipids at low temperatures through Slipid force field*, J. Phys. Conf. Ser. **2436** (2023) 012025.

- [97] N. Ivanova and H. Chamati, *The effect of cholesterol in SOPC lipid bilayer at low temperatures*, *Membranes* **13** (2023) 275.
- [98] M. Georgiev, T. Baronian and H. Chamati, *A self-consistent exact diagonalization approach to the ground state magnetic properties of the meridional $[V(ddpd)_2]^{3+}$ complex*, *Inorganics* **11** (2023) 268.
- [99] M. Georgiev and H. Chamati, *The magnetic behavior of trigonal (bi-)pyramidal $3d^8$ mononuclear nanomagnets: The case of $[Ni(MDABCO)_2Cl_3]ClO_4$ complexes*, *ACS Omega* **8** (2023) 28640.
- [100] E. Iordanova, P. Miteva, D. Dakova, H. Chamati, G. Yankov, D.A. Georgieva and L.M. Kovachev, *Linear and nonlinear optics of broad-band laser pulses: Diffraction*, *ACS Omega* **9** (2024) 20648.