

РЕЗИЮМЕТА*

(на български език)

на трудовете на доц. д-р Илиана Наумова Апостолова,

представени за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „професор“ към катедра „Математика, физика и информатика“, област на висше образование **4. Природни науки, математика и информатика**, професионално направление **4.1. Физически науки**, научна специалност „Електрични, магнитни и оптични свойства на кондензираната материя (мултифероични свойства на обемни образци и наноматериали)“, по дисциплината „Физика с биофизика“, обнародван в Държавен вестник, бр.102 от 8.12.2023 г. и публикуван на Интернет страницата на ЛТУ.

Код на процедурата: WWI-P-1123-112

*Номерацията на разделите и публикациите е в съответствие с Приложение 2 – Оценка на съответствието с МНИ

В4. Хабилитационен труд - научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science и Scopus) (Магнетоелектрични взаимодействия в обемни образци и наноструктури – 11 бр. публикации).

В4.1. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, J. M. Wesselinowa, Theoretical study of the multiferroic properties of DyFeWO₆, European Physical Journal B 95, 133 (2022). ISSN (Print) 1434-6028, ISSN (Online) 1434-6036, Q₃, SJR 0,4, IF 1,6 doi: 10.1140/epjb/s10051-022-00396-9

Резюме:

Намагнитеността M , специфичната топлоемкост C_p , поляризацията P и диелектричната константа ϵ на DyFeWO₆ се изследват за първи път с помощта на микроскопичен модел и метода на функциите на Грийн. Изследва се зависимостта на M от магнитното поле за температури под и над T_N . C_p показва аномалия при температурата на Неел T_N , която изчезва при прилагане на външно магнитно поле h . P намалява с увеличаване на h . Антиферомагнитният преход в DyFeWO₆ е придружен от пик в ϵ . С увеличаване на магнитното поле пикът намалява, измества се към по-малки стойности на T_N и при силни магнитни полета изчезва. Поведението на P и ϵ при прилагане на магнитното поле е доказателство за мултифероичността на DyFeWO₆. Наблюдаваните резултати са в добро качествено съответствие със съществуващите експериментални данни.

В4.2. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Origin of multiferroism in Sm₂BaCuO₅, Solid State Communications 352, 114808 (2022). ISSN 0038-1098, Q₃, SJR 0,41, IF 2,1 doi: 10.1016/j.ssc.2022.114808

Резюме:

Предлагайки микроскопичен модел, се изследват мултифероичните свойства на Sm₂BaCuO₅. Топлинният капацитет има два пика при температурите на антиферомагнитните преходи $T_{N1} \sim 5$ К и $T_{N2} \sim 23$ К. Като причина за появата на допълнителна поляризация ΔP в Sm₂BaCuO₅ разгледахме механизма на еднородната магнитострикция. ΔP е нула без магнитно поле. Външно магнитно поле h индуцира електрическа поляризация ΔP под T_{N2} , която се променя линейно с h , показвайки линеен магнетоелектричен ефект. Под T_{N1} ΔP намалява поради подреждането на Sm-подрешетката. Съществуват несъответствия в експерименталните данни за $\Delta P(T, h)$, които се опитваме да изясним. Обсъжда се зависимостта на диелектричната константа от температурата и магнитното поле. Наблюдаваната максимална стойност на пика при T_{N2} се измества към по-ниски температурни стойности и се увеличава с увеличаване на външното магнитно поле.

B4.3. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, J. M. Wesselinowa, Origin of multiferroism of β -NaFeO₂, Magnetochemistry 8, 104 (2022). ISSN 2312-7481, Q₂, SJR 0,43, IF 2,7 doi: 10.3390/magnetochemistry8090104

Резюме:

Мултифероичният β -NaFeO₂ е теоретично изследван за първи път с помощта на микроскопичен модел и метода на функциите на Грийн. Наблюдава се слаб феромагнетизъм при стайна температура, който може да се обясни с наклоняване на антиферомагнитните подрешетки. Феромагнитното поведение може да се приложи в спинтронни устройства. Изследвана е зависимостта на спонтанната поляризация P_S , изчислена от напречния модел на Ising, от температурата и магнитното поле и зависимостта на спин-индуцираната поляризация ΔP от магнитострикция и антисиметрични взаимодействия от тип Dzyaloshinsky-Moriya. Обсъжда се влиянието на външните магнитни полета, приложени по оста y и z . Това е косвено доказателство за мултифероичното поведение на NaFeO₂. Изчислена е температурната зависимост на относителната диелектрична проницаемост.

B4.4. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Antiferroelectricity and weak ferromagnetism in rare earth doped multiferroic BiFeO₃, Solid State Communications 300, 113692 (2019). ISSN 0038-1098, Q₃, SJR 0,41, IF 1,521(2019) doi: 10.1016/j.ssc.2019.113692

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел и метода на функциите на Грийн се изследват остатъчната поляризация P_r и остатъчната намагнитеност M_r за различни Sm-концентрации x в Sm-дотиран BiFeO₃ образец. За чист BiFeO₃ с ромбодрична симетрия получаваме хистерезисна крива $P(E)$, която е типична за фероелектричен материал. По-нататъшното увеличаване на x ($x = 0.16$) води до двойна хистерезисна крива, която е типична за антифероелектрично вещество. Заместването на Sm индуцира слаб феромагнитен момент при стайна температура. Зависимостта на P_r и M_r от x показва максимум при $x = 0.05$. Температурата на фероелектричния фазов преход T_C намалява силно, докато температурата на магнитния фазов преход T_N се повишава леко с увеличаване на концентрацията x на Sm.

B4.5. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Room temperature ferromagnetism in multiferroic BaCoF₄ thin films due to surface, substrate and ion doping effects, Thin Solid Films 722, 138567 (2021). ISSN 0040-6090, Q₂, SJR 0,47 IF 2,358(2021) doi: 10.1016/j.tsf.2021.138567

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел и метода на функциите на Грийн се изследва влиянието на различните ефекти на повърхността, размера и подложката върху магнитните свойства на тънките филми BaCoF₄. Намагнитеността и температурата на магнитния фазов преход се повишават за подложка от Al₂O₃, която предизвиква напрежение на свиване, и намаляват за подложка от MgO, която предизвиква напрежение на разтягане. Дебелината на филма също влияе върху магнитните свойства. Обсъдена е конкуренцията между ефектите на повърхността и подложката. Дотирането на BaCoF₄ обемен образец с Al йони води до възникване на слаб феромагнетизъм при стайна температура. Благодарение на магнетоелектричната връзка поляризацията се увеличава с увеличаване на външното магнитно поле.

B4.6. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Substrate and doping effects on the multiferroic properties and the band gap of Bi₂FeCrO₆ thin films, Thin Solid Films 739, 138977 (2021). ISSN 0040-6090, Q₂, SJR 0,47, IF 2,358 doi: 0.1016/j.tsf.2021.138977

Резюме:

На базата на микроскопичен модел са изследвани зависимостите на намагнитеността M , поляризацията P и ширината на забранената зона от температурата, размера и магнитното поле в двойни перовскитни тънки филми Bi₂FeCrO₆. Обсъждат се повърхностните ефекти и ефектът на

подложката. P показва аномалия при температурата на Неел T_N , което е доказателство за силна магнетоелектрична връзка. Външното магнитно поле увеличава поляризацията и аномалията при T_N изчезва. M и P се увеличават или намаляват с намаляване на дебелината на филма и зависят от вида подложката, поради възникналите напрежения на свиване или напрежения на разтягане, съответно. Увеличаване на M се получава също чрез La йонно дотиране на $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$, което води до възникване на напрежение на свиване. Изчислена е ширината на забранената зона в зависимост от подложката и ефектите на дотиране.

B4.7. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Electric, dielectric and magnetic properties of Ga, Er and Zn ion doped Fe_2O_3 thin films, Physics Letters A 393, 127167 (2021). ISSN 0375-9601, Q2, SJR 0,51, IF 2,707 doi:10.1016/j.physleta.2021.127167

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел се изследват електричните, диелектричните и магнитните свойства на тънки филми $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, дотирани с Ga, Er и Zn. Поляризацията P в дотиран с Ga $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ намалява с увеличаване на съдържанието на Ga x и се увеличава с усилване на магнитното поле h и намаляване на дебелината на филма N . В дотиран с Ga хематит диелектричната константа ϵ показва пик при T_C . ϵ намалява с увеличаване на h , което показва силен магнетодиелектричен ефект. Разглеждат се приносите на спин-фононите и фонон-фононите взаимодействия под и над T_C . Диелектричната константа в Fe_2O_3 , дотиран с йони Ga, Er и Zn, може да се увеличи или намали за различни йони и различна концентрация на йонно дотиране. Изчислява се също и зависимостта на намагнитеността от йонното дотиране.

B4.8. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Multiferroic properties of pure and ion doped BiCrO_3 - bulk and thin films, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 259(11), 2200171 (2022).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q3, SJR 0,41, IF 1,6

doi: 10.1002/pssb.202200171

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел се изследват за първи път мултифероичните свойства на обемни образци и тънки филми BiCrO_3 (BCO). Влиянието на йонното дотиране върху мултифероичните свойства на BCO също се изучава тъй като процесът на дотиране променя физичните свойства. BCO обемни образци и тънки филми могат да се използват за потенциални приложения в магнетоелектронни устройства. Намагнитеността M се увеличава при дотиране с Mn-йони и намалява при дотиране с Ga-йони, докато температурата на Неел T_N намалява и в двата случая. В литературата няма единно мнение дали BCO е фероелектрик или антифероелектрик. Показано е, че обемният недотиран BCO е антифероелектричен, тъй като зависимостта на поляризацията P от електрическото поле показва двойна хистерезисна бримка и диелектричната константа няма аномалии при T_N . В Ga-, Mn- или Ti-дотиран BCO се появява фероелектрична поляризация. Специфичната топлоемкост показва пик при T_N за BCO. При Ga дотиране този пик изчезва с увеличаване на x . Мултифероичното поведение на BCO се демонстрира в зависимостта на диелектричната константа от магнитното поле. В BCO тънки филми се наблюдава фероелектрично и феромагнитно поведение.

B4.9. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Size, external fields and ion doping effects on the multiferroic properties of hexagonal YMnO_3 nanoparticles, Materials Today Communications 30, 103123 (2022).

ISSN 2352-4928, Q2, SJR 0,62, IF 3,8 doi: 10.1016/j.mtcomm.2022.103123

Резюме:

Теоретично е изследвана зависимостта на различни свойства на хексагоналните YMnO_3 наночастици (НЧ) от размера, външното поле и дотирането. Спонтанната намагнитеност M_S се увеличава с увеличаване на електричното поле и намалява с намаляване на размера на НЧ N . Поляризацията намалява с увеличаване на магнитното поле h . Ширината на забранената зона се увеличава с намаляване на N . Фононният мод $\omega_0 = 167 \text{ cm}^{-1}$ показва аномалия при T_N поради

силно спин-фононно взаимодействие. При прилагане на h аномалията изчезва. Чрез дотиране с различни йони, заместващи Mn, поради наблюдаваните различни напрежения, M_S може да се увеличи или намали. При дотиране с Ti йони, над критична стойност x , се появява хексагонално-орторомбичен фазов преход. Обсъжда се също заместването с Gd и Sr на Y йони в $YMnO_3$ НЧ. Изследва се зависимостта на диелектричната функция от температурата, размера на НЧ и h . Показани са приносите на електроните и фононите в специфичната топлоемкост C_p .

B4.10. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Multiferroic Properties of Pure, Transition Metal, and Rare Earth–Doped $BaFe_{12}O_{19}$ Nanoparticles, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 258(7), 2100069 (2021). ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951 Q₃, SJR 0,41, IF 1,782 doi: 10.1002/pssb.202100069

Резюме:

Различни свойства на недотирани и дотирани с Ni, Zr и Sm $BaFe_{12}O_{19}$ обемни образци и наночастици се изследват с помощта на микроскопичен модел и метода на функциите на Грийн.

Намагнитеността M_S се увеличава, докато коерцитивното поле H_C намалява с увеличаване на размера на частиците. Увеличаването на концентрацията x при дотирането с Zr води до намаляване на M_S и на ширината на забранената зона E_g поради деформация на опън и до увеличаване на M_S и E_g при дотиране с Ni поради деформация на натиск, както и поради ефектите на размера. Поведението на спонтанната поляризация P_S и на реалната част ϵ' на диелектричната проницаемост е противоположно. ϵ' на недотирана наночастица $BaFe_{12}O_{19}$ намалява с увеличаване на магнитното поле h . Ефектите от заместването на Sm в Ba или Fe места върху ϵ' и M_S също се изследват.

B4.11. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Physical Origin of Magneto-electroporation, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 260(3), 2200523 (2023). ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₃, SJR 0,41, IF 1,6(2022) doi: 10.1002/pssb.202200523

Резюме:

Магнетоелектропорацията е ефективен метод за отваряне на нанопори в клетъчните мембрани с помощта на магнетоелектрични наночастици (МЕНЧ) за целите на in vivo и in vitro доставяне на лекарствени вещества към раковите клетки. Като теоретична основа на това явление се предлага микроскопичен подход. Основният Хамилтониан включва магнитните и фeroелектричните подсистеми, характеризиращи се с два параметъра на подреждане. Магнетоелектричен коефициент α_{HE} характеризира връзката между приложеното магнитно поле и генерираното локално електрическо поле. Освен спонтанната поляризация P_S на МЕНЧ, дължаща се на подреждането на електричните диполи, се появява и допълнителна спин-индуцирана поляризация ΔP , дължаща се на магнитния фазов преход. Показано е, че основният принос към локалното поле идва от P_S . Освен това, локалното електрическо поле зависи от ориентацията на лесната ос на намагнитване на МЕНЧ спрямо приложеното външно магнитно поле. Магнетоелектричният коефициент проявява нелинейна зависимост от външното магнитно поле. Резултатите се основават на аналитичния метод на функциите на Грийн. Числените изчисления са направени за сферични, структурно хетерогенни наночастици, съставени от ядро и обвивка, като невзаимодействащите наночастици имат еднакъв диаметър от 25 nm. Резултатите са в качествено съответствие с експериментално наблюдаваните.

Г7. Научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science and SCOPUS), извън хабилитационния труд (47 бр. публикации).

Г7.1. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, S. G. Bahoosh, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Enhancement of the magnetoelectric effect in doped BaTiO₃ nanoparticles, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 252(8), 1839 (2015).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,665, IF 1,522

doi: 10.1002/pssb.201451752

Резюме:

Експериментално е доказано, че поляризацията P и намагнитеността M на BaTiO₃ (ВТО) наночастиците се променят при дотиране с преходни метали, например Fe-йони. Използвайки модифициран спинов модел за магнитната и фероелектричната подсистема, както и магнетоелектричното сдвояване, е изчислена зависимостта на M и P от концентрацията на дотираните Fe-йони в ВТО наночастици. Температурите на фероелектричния и феромагнитния фазов преход T_C^{fe} и T_C^{fm} също се променят при дотиране. Поради повърхностните ефекти влиянието на дотирането може да бъде по-силно в сравнение с обемни образци. Докато M и T_C^{fm} нарастват с увеличаване на концентрацията на Fe-йони, P и T_C^{fe} намаляват, ако концентрацията на дотираните йони се повиши.

Г7.2. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, S. G. Bahoosh, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Origin of multiferroism in the charge frustrated LuFe₂O₄ compound, Physics Letters A 379(7), 743-746 (2015).

ISSN (Print) 0375-9601, ISSN (Online) 1873-2429, Q₂, SJR 0,663, IF 1,677

doi: 10.1016/j.physleta.2014.12.043

Резюме:

Предлага се микроскопичен модел за изследването мултифероичните свойства на LuFe₂O₄ образец. Показано е, че реалната част на диелектричната константа ϵ' има плато близо до магнитния фазов преход $T_N = 240$ К. При стайна температура ϵ' намалява силно при прилагане на външно магнитно поле H . Това поведение е доказателство за силна връзка между спиновете и електричните диполи, в съответствие с експерименталните данни. Наблюдаваните аномалии в температурната зависимост на фононната енергия и затихването на E_g^3 мода около температурите на фероелектричния и феримагнитния преход показват, че този фононен мод е тясно свързан със структурните, магнитните и фероелектричните свойства на LuFe₂O₄.

Г7.3. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, S. G. Bahoosh, S. Trimper, M. T. Georgieva and J. M. Wesselinowa, Multiferroic properties of S = 1/2 chain cuprates LiCuVO₄. Comparison with LiCu₂O₂, Modern Physics Letters B 29(17), 1550086 (2015).

ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₃, SJR 0,248, IF 0,547

doi: 10.1142/S0217984915500864

Резюме:

Предлага се микроскопичен модел за изследване на мултифероичните (МФ) свойства на LiCuVO₄ (LCVO), като се вземат предвид конкуриращите се магнитни взаимодействия между най-близките и вторите най-близки съседи, фрустрирането и линейна магнетоелектрична (МЕ) връзка. Получава се за $\alpha = |J_2/J_1| = 0,76$. Изследвана е зависимостта на поляризацията P_a и P_c от температурата и магнитното поле. Показано е, че диелектричната константа ϵ_a има аномалия в близост до магнитния фазов преход $T_N = 2,4$ К, която изчезва с увеличаване на външното магнитно поле. Обсъждат се някои разлики в МФ поведението на LiCu₂O₂ (LCO) и LCVO.

Г7.4. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, J. M. Wesselinowa and S. Trimper, Magnetic and dielectric properties of S = 1/2 chain cuprate Li₂ZrCuO₄, Physica Status Solidi B: Basic

Solid State Physics 252(12), 2667 (2015).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,665, IF 1,522

doi: 10.1002/pssb.201552311

Резюме:

Предлага се микроскопичен модел за изследване на мултифероичните свойства на $\text{Li}_2\text{ZrCuO}_4$ при ниски температури, като се вземат предвид конкуриращите се магнитни взаимодействия между най-близките и вторите най-близки съседи, фрустрирането и линейна магнетоелектрична връзка. За да се обясни експериментално наблюдаваното поведение е включено антифероелектрично взаимодействие между CuO_2 веригите. Намагнитеността $M(T)$ има пик при температурата на антиферомагнитния преход T_N . В диелектричната функция $\epsilon_a(T, H_a)$ не се появява аномалия при тази температура, но ϵ може да се управлява от външно магнитно поле H_a . Тя намалява с увеличаване на магнитното поле H_a . Нашият анализ не дава индикация за „glass-like“ подреждане на Li йони.

Г7.5. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Microscopic approach to the magnetoelectric coupling in $R\text{CrO}_3$, Modern Physics Letters B 29(1), 1550251 (2015).

ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₃, SJR 0,248, IF 0,547

doi: 10.1142/S0217984915502516

Резюме:

Предлага се микроскопичен модел за описание на мултифероичните свойства на $R\text{CrO}_3$, където R е магнитен редкоземен йон. Използвайки теорията на функциите на Грийн, слабият феромагнетизъм и коерцитивното поле се изчисляват чрез баланс между взаимодействието на Dzyaloshinskii-Moriya, еднйонната анизотропия и обменното взаимодействие. Дискутиран е спин-преориентационният (СП) магнитен преход между фазите Γ_4 и Γ_2 в SmCrO_3 и резкият между Γ_4 и Γ_1 в ErCrO_3 , изчислявайки енергиите в съответните фази. Видът на фазовия преход в $R\text{CrO}_3$ се определя от знака на втората константа на магнитната анизотропия. За да се изследва произхода на допълнителното фероелектричество в $R\text{CrO}_3$ се разглеждат различните приноси в поляризацията, дължащи се на антисиметричното обменно Dzyaloshinskii-Moriya взаимодействие и магнитострикцията, произтичаща от Cr-подреждането. Показано е, че поляризацията се дължи на взаимодействието между магнитните R - и Cr-йони. Влиянието на магнитното поле върху поляризацията и на електричното поле върху намагнитеността също се изчисляват като доказателство за силна магнетоелектрична връзка в $R\text{CrO}_3$.

Г7.6. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Theory of magnetic field control on polarization in multiferroic $R\text{CrO}_3$ compounds, European Physical Journal B 88,

328 (2015). ISSN (Print) 1434-6028, ISSN (Online) 1434-6036, Q₂, SJR 0,514, IF 1,223

doi: 10.1140/epjb/e2015-60649-4

Резюме:

Предлага се микроскопичен механизъм за описание на зависимостта на поляризацията P от магнитното поле H в $R\text{CrO}_3$, на базата на микроскопичен модел и включено спин-фононно взаимодействие. Използвайки теорията на функциите на Грийн в Peierls системите, са изследвани двата приноса към P , дължащи се на антисиметричното обменно взаимодействие Dzyaloshinskii-Moriya P_{AS} и магнитострикционния P_{MS} . Поведението на $P(H)$ (увеличаване или намаляване) в различни мултифероични може да се обясни в използвания модел като се вземат предвид константите на спин-фононното взаимодействие от втори ред. Когато се приложи магнитно поле към магнетоелектричен материал, материалът се деформира. H променя средната стойност на спиновите оператори и така променя и P . Освен това, H ренормира еластичната константа, което обяснява ефекта на деформация. По този начин се открива качествена връзка между ефектите на налягането и магнитното поле върху P . Наблюдаваните резултати са в добро качествено съответствие с експерименталните данни.

Г7.7. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Magnetoelectric coupling and spin reorientation in BiFeO_3 , Physical Status Solidi B: Basic Solid State

Physics 254(4), 1600433 (2016).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₁, SJR 0,96, IF 1,674

doi: 10.1002/pssb.201600433

Резюме:

Изследвани са електричните свойства на мултифероичния BiFeO₃ (BFO), използвайки напречния модел на Изинг в псевдо-спиново представяне с $S = 7/2$ и метода на функциите на Грийн. Изследват се механизмите на магнетоелектричната (МЕ) връзка и индуцираният от електричното поле спин-преориентация (СП) преход в BFO. Установено е, че спонтанната поляризация P_S е отговорна за произхода на несъразмерима, неколинеарна магнитна фаза под T_N . Показано е значението на два типа МЕ механизми: първият е квадратичен по отношение на магнитните и поляризационните спинове, докато вторият дефинира МЕ взаимодействие, което се индуцира от появата на спонтанна поляризация в BFO, наречено антисиметрично МЕ взаимодействие. Когато се приложи външно магнитно поле, двата механизми се конкурират помежду си, и в резултат на това спонтанната поляризация P_S се ренормира. Допълнителната поляризация под T_N се пресмята числено и се изследва нейната зависимост от константата на анизотропия K по остта на най-лесно намагнитване и външното магнитно поле. Определя се вида на магнитния СП преход, причинен от електричното поле. Критичните стойности на E за различни процеси на спинова преориентация се изчисляват числено.

Г7.8. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Influence of spin-phonon interactions and spin-reorientation transitions on the phonon properties of RCrO₃, Modern Physics Letters B 31(03), 1750009 (2017).

ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₄, SJR 0,226, IF 0,731

doi: 10.1142/S0217984917500099

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн е изследвана ренормираната фононна енергия в мултифероични RCrO₃ ($R = \text{Sm, Dy, Er, Pr, Gd}$ и Y) съединения като функция на температурата, магнитното поле и R -йонния радиус. Обяснени са наблюдаваните аномалии в температурната зависимост на фононните спектри въз основа на подробен анализ на влиянието на магнитните подрешетки и взаимодействието между тях и влиянието на трептенията на решетката върху спин-преориентация (СП) преход чрез спин-фононните взаимодействия. Когато редкоземните йони са магнитни, е изследвана тяхната съществена роля за аномалиите около температурата на SR преход. За случая, когато R е немагнитен, например YCrO₃, е предложен нов микроскопичен модел. Дефинирано е индуцирано Dzyaloshinskii-Moriya (ИДМ) взаимодействие, което се дължи на спонтанната поляризация. На ИДМ взаимодействие се дължи появата на температурно зависим СП преход, който е отговорен за фононните аномалии при ниски температури. Числените пресмятания са в добро качествено съответствие с експерименталните данни.

Г7.9. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Room temperature ferromagnetism in pure and ion doped SnO₂ nanoparticles, Modern Physics Letters B, 31(36) 1750351 (2017).

ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₄, SJR 0,226, IF 0,731

doi: 10.1142/S0217984917503511

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел, отчитащ спин-фононните взаимодействия, са изучени магнитните свойства на недотирани и йонно дотирани SnO₂ наночастици (НЧ). Намагнитеността M в недотирани SnO₂ НЧ се дължи на наличието на повърхностни кислородни ваканции. При дотиране с магнитни Со йони се наблюдава максимум в M за малка Со-концентрация ($x = 1\%$), докато за немагнитни Си йони M нараства с x . Показано е, че има силна връзка между решетката и M . Резултатите са в добро съответствие с експерименталните данни.

**Г7.10. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Dielectric properties of multiferroic CuCrO₂, European Physical Journal B 90, 236 (2017).
ISSN (Print) 1434-6028, ISSN (Online) 1434-6036, Q₂, SJR 0,43, IF 1,536
doi: 10.1140/epjb/e2017-80461-4**

Резюме:

Предложен е микроскопичен модел за изследване на мултифероичните свойства на съединението CuCrO₂, като се отчитат антиферомагнитните взаимодействия в равнината *ab*, спин-фононните взаимодействия и квадратичното магнетоелектрично (МЕ) взаимодействие. Изчислява се зависимостта на поляризацията P_{ab} и диелектричната константа ϵ_{ab} от температурата и магнитното поле. P_{ab} се увеличава, когато h е успоредно на посоката \hat{u} и намалява, когато h е перпендикулярно на нея. Показано е, че ϵ_{ab} има аномалия близо до магнитния фазов преход $T_N = 24$ К, който изчезва с увеличаване на външното магнитно поле h_{ab} . Това поведение е доказателство за силна МЕ връзка и в качествено съответствие с експерименталните данни.

**Г7.11. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, La_{1-x}Sr_xMnO₃ nanoparticles for magnetic hyperthermia, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 255(6), 1700587 (2018).
ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,519, IF 1,454
doi: 10.1002/pssb.201700587**

Резюме:

Използвайки модифициран модел на Хайзенберг и техника на функциите на Грийн се изследва влиянието на размера d и концентрацията x при дотиране със Sr върху температурата на Кюри T_C , намагнитеността на насищане M_S , коерцитивността H_C и коефициента на абсорбираната топлинна мощност (т. нар. SAR коефициент) на La_{1-x}Sr_xMnO₃ еднодомени наночастици. Техните магнитни свойства се обясняват с наличието на повърхнинен „магнитно-мъртав“ слой и конкуренцията между феромагнитното двойно-обменно и антиферомагнитното супер-обменно взаимодействие. Изчислен е SAR коефициентът, който характеризира ефективността на абсорбиране на енергия, когато магнитната хипертермия се прилага като терапевтичен метод за лечение на тумори. Определени са набор от наночастици, подходящи за *in vivo* и *in vitro* медицински приложения, като например магнитна хипертермия и доставяне на лекарства до раковите клетки. Установената методология и микроскопичният модел са подходящи за изследване на магнитните свойства на нискоразмерни системи (тънки филми и наночастици) като La_{1-x}A_xMnO₃ с A = Ca, Ag, Ba, Na за медицински приложения.

**Г7.12. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, A comparative study of the magnetization in transition metal ion doped CeO₂, TiO₂ and SnO₂ nanoparticles, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 99, 202 (2018).
ISSN 1386-9477, Q₂, SJR 0,538, IF 3,176 doi: 10.1016/j.physe.2018.02.007**

Резюме:

Използвайки микроскопичния s-d модел, с отчитане на анхармоничните спин-фононни взаимодействия, са изследвани магнитните свойства на CeO₂ и TiO₂ наночастици, дотирани с Co и Cu йони, и са сравнени със свойствата на SnO₂ наночастици. При дотиране с Co се наблюдава максимум в кривата на намагнитване $M(x)$ за всички разглеждани наночастици, като това е в сила и при дотиране с йони на повечето преходни метали. s-d взаимодействието играе важна роля за намаляване на M при по-висока степен на дотиране. Обсъдена е зависимостта на намагнитеността от различни моделни параметри. Съществуват някои различия при дотиране в малки концентрации с Cu-йони. В CeO₂ M намалява с увеличаване на концентрацията на Cu, докато в TiO₂ и SnO₂ M нараства. За по-високи концентрации на дотиране с Cu $M(x)$ намалява в TiO₂ наночастици. Доказано е наличие на феромагнетизъм при стайна температура в CeO₂, TiO₂ и SnO₂ наночастици, дотирани с Zn. Различното поведение на M в Co и Cu дотирани наночастици се дължи на комбиниран ефект от многовалентни метални йони, кислородни

ваканции, различни радиуси на дотиращите катионни, връзка между решетка и магнетизъм, както и конкуренция между s-d и d-d феромагнитни или антиферомагнитни взаимодействия.

Г7.13. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Theoretical study of room temperature ferromagnetism and band gap energy of pure and ion doped In_2O_3 nanoparticles, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 456, 263 (2018). ISSN 0304-8853, Q₂, SJR 0,68, IF 2,683 doi: 10.1016/j.jmmm.2018.02.045

Резюме:

Използвайки s-d микроскопичния модел, отчитайки електрон-фононното взаимодействие и теорията на функциите на Грийн, е разгледан произходът на феромагнетизъм при стайни температури (RTFM) в недотирани и йонно дотирани In_2O_3 наночастици (НЧ). Намагнитеността M нараства с намаляване на размера на частиците. Изследвана е M при дотиране с Fe, Tb и Mn на In_2O_3 НЧ, като съответно M нараства, намаляват и имат максимум с увеличаване на степента на дотиране. RTFM се дължи на наличие на кислородни ваканции на повърхността и различния йонен радиус на дотиращите йони в сравнение с йонния радиус на заместените йони. Тези разлики водят до възникването на различни напрежения, които променят константите на обменното взаимодействие. Изчислена е зависимостта на ширината на забранената зона от размера на In_2O_3 НЧ и концентрацията на Fe в Fe дотирани In_2O_3 НЧ. Резултатите са в добро качествено съответствие с експерименталните данни.

Г7.14. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Theoretical study of the phonon properties of pure and ion doped CeO_2 nanoparticles, Solid State Communications 279, 17 (2018). ISSN 0038-1098, Q₂, SJR 0,45, IF 1,433 doi: 10.1016/j.ssc.2018.05.007

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел, отчитащ спин-фононните взаимодействия, са изучени фононните свойства на недотирани и йонно дотирани CeO_2 наночастици (НЧ). Фононната енергия ω намалява, докато затихването γ се увеличава с повишаване на температурата и намаляване на размера на частиците. Близко до температурата на Кюри в НЧ се появява аномалия в $\omega(T)$ и $\gamma(T)$. Фононните свойства са особено чувствителни към анхармоничното спин-фононно взаимодействие. В зависимост от радиуса на дотиращите йони в сравнение с заместените йони ω може да намалява (Pr, Sm, Nd, La) или да се увеличава (Co, Y, Cu). Промените в параметрите на решетката водят до промени в константите на обменното взаимодействие и анхармоничното спин-фононно взаимодействие. Фононното затихване винаги се увеличава при дотиране на НЧ. Показано е, че промените във фононната енергия и затихването на йонно дотираната CeO_2 НЧ се дължат на комбинирани ефекти от размера и напрежението.

Г7.15. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Size and doping dependence of the phonon properties of SnO_2 nanopartocles, Modern Physics Letter B 32(21), 1850250 (2018). ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₄, SJR 0,229, IF 0,929 doi: 10.1142/S0217984918502500

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел, отчитащ спин-фононните взаимодействия и техниката на функциите на Грийн, са изучени фононните свойства на недотирани и йонно дотирани SnO_2 наночастици (НЧ). Фононната енергия на SnO_2 НЧ намалява, докато затихването се увеличава с намаляване на размера на частиците. Близко до температурата на Кюри на НЧ се появява аномалия във фононната енергия $\omega(T)$ и затихването $\gamma(T)$. Фононните свойства са много чувствителни към анхармоничното спин-фононно взаимодействие R . Те могат да се увеличат или намалят съответно за $R > 0$ или $R < 0$ с повишаване на температурата. В зависимост от радиуса на дотираните йони, фононните енергии ω могат да намаляват (Co, Fe, Sm, Nd) или да се увеличават (Cu). Фононното затихване винаги се увеличава в дотираните НЧ. В обобщение, поради ефектите на размера и температурата се променя фононната енергия и затихването в

Г7.16. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Magnetic properties of rare earth-doped SnO₂, TiO₂ and CeO₂ nanoparticles, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 255(8), 1800179 (2018).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,519, IF 1,454

doi: 10.1002/pssb.201800179

Резюме:

Теоретично са изследвани магнитните свойства на SnO₂, TiO₂ и CeO₂ наночастици, дотирани с редкоземни елементи. Обясняват се противоречивите данни в литературата за някои случаи на дотиране. Съществува силна връзка между деформациите на решетката и намагнитеността M . M намалява (с изключение на CeO₂ дотиран с Y) поради по-големия радиус на редкоземните йони в сравнение с този на замествания йон, което води до увеличаване на параметрите на решетката и намаляване на обменните взаимодействия. Намаляването на M се дължи и на увеличаване брой кислородни ваканции с увеличаване степента на дотиране. За Y дотирани наночастици параметрите на решетката намаляват и M се увеличава с увеличаване на концентрацията на Y. Обсъдени са причините за различното поведение на M в наночастици, дотирани с редкоземни елементи.

Г7.17. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Ferroelectricity in the multiferroic delafossite CuFeO₂ induced by ion doping or magnetic field, Solid State Communications 292, 11 (2019). ISSN 0038-1098, Q₃, SJR 0,419, IF 1,521

doi: 10.1016/j.ssc.2019.01.014

Резюме:

На базата на микроскопичен модел и с помощта на техниката на функциите на Грийн е изследвана индуцираната фероелектрична поляризация $P_{[110]}$ в направление [110] в CuFeO₂. Показано е, че $P_{[110]}$ се индуцира от външно магнитно поле, успоредно на оста c h_c или немагнитно йонно дотиране, като и двата случая могат да нарушат инверсната симетрия на системата. Хамилтонианът съдържа антиферомагнитни взаимодействия от Хайзенбергов тип в и извън ab равнината и анхармонични спин-фононни взаимодействия. $P_{[110]}$ намалява с повишаване на температурата T . $P_{[110]}$ се появява се при $T \sim 9$ К и започва да нараства под $T \sim 9$ К, което е температурата на преход към неколинеарна фаза. Това поведение е доказателство за мултифероичния характер на CuFeO₂. При дотиране с Rh йони в кривата $P_{[110]}(x)$ с увеличаване на концентрацията на Rh x се наблюдава максимум, докато при Sc дотиране поляризацията намалява. Наблюдаваните резултати са в качествено съответствие с експерименталните данни.

Г7.18. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Specific absorption rate in Zn-doped ferrites for self-controlled magnetic hyperthermia, European Physical Journal B 92, 58 (2019). ISSN (Print) 1434-6028, ISSN (Online) 1434-6036, Q₂, SJR 0,459 IF 1,347

doi: 10.1140/epjb/e2019-90567-2

Резюме:

В тази статия са изследвани наночастици от смесени ферити със структурна формула $Me_{1-x}Zn_xFe_2O_4$ ($Me = Co, Ni, Cu, Mn$), подходящи за самоконтролираща се магнитна хипертермия (SMHT) за *in vivo* и *in vitro* приложения. Обсъдено е подробно влиянието на размера d и концентрацията на Zn-йони x върху магнитните характеристики: намагнитеност на насищане M_S , коерцитивност H_C , ефективна константа на анизотропия K_{eff} и коефициент на абсорбираната топлинна мощност (т. нар. SAR коефициент). От теоретична гледна точка са изследвани монодисперсни, невзаимодействащи, еднодоменни сферични магнитни наночастици (МНЧ). Предлага се опростен модел сърцевина-обвивка с постоянна дебелина на повърхностния слой. Обяснена е зависимостта на SAR коефициента от размера и дотирането въз основа на два механизма на термично нагриване. Изследвана е също и зависимостта на ефективността на топлинно нагриване от концентрацията на Zn-йони. Показано е, че SAR коефициентът намалява или се увеличава при увеличаване на дотирането в зависимост от това дали диаметърът на

наночастиците d е по-малък или по-голям от определен размер на частицата d_{max} , за който SAR коефициентът има максимална стойност. Числените резултати са в качествено съответствие с много експериментални данни.

Г7.19. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Phonon properties of delafossite multiferroic compound $CuFeO_2$. Comparison with $CuCrO_2$, Modern Physics Letters B 33(12), 1950141 (2019).

ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₃, SJR 0,258, IF 1,224

doi: 10.1142/S0217984919501410

Резюме:

Зависимостта на фононните свойства на $CuFeO_2$ от температурата, магнитното поле и йонното дотиране се изследват на базата на микроскопичен модел и с помощта на техниката на функциите на Грийн. Фононната енергия намалява с повишаване на температурата, докато фононното затихване се увеличава. Наблюдава се аномалия при температурата на фазов преход T_{N1} , която показва влиянието на магнитното поле върху фононните свойства. Тя изчезва при прилагане на външно магнитно поле. Чрез дотиране на йони с различен радиус в сравнение с Fe йон, фононната енергия в $CuFeO_2$ може да се увеличи (Ga) или да намалее (Sc) с увеличаване на степента на дотиране, докато затихването винаги нараства. Резултатите са сравнени с тези на недотиран $CuCrO_2$. Обсъждат се някои противоречиви данни в литературата. Наблюдаваните резултати са в качествено съответствие с експерименталните данни.

Г7.20. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Magnetic and dielectric properties of pure and ion doped $RCrO_3$ nanoparticles, European Physical Journal B 92, 105 (2019). ISSN (Print) 1434-6028, ISSN (Online) 1434-6036, Q₂, SJR 0,459, IF 1,347

doi: 10.1140/epjb/e2019-100112-x

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн, магнитните и диелектричните свойства на $YCrO_3$ и $GdCrO_3$ наночастиците (НЧ) са изследвани и сравнени със свойства на обемни образци. Поради различни константи на обменно взаимодействие на повърхността, намагнитеността в $YCrO_3$ се увеличава, докато в $GdCrO_3$ тя намалява с намаляване на размера на частиците. Дискутирана е и зависимостта от размера на коерцитивното поле в $GdCrO_3$ НЧ. Диелектрична константа ϵ' в $YCrO_3$ обемен образец е по-малка от тази в НЧ, докато в $GdCrO_3$ се наблюдава обратното поведение. Магнитното поле влияе на ϵ' в $YCrO_3$ НЧ, което е косвено доказателство за силна магнетоелектрична връзка. Влиянието на йонното дотиране върху ϵ' също е изследвано.

Г7.21. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Origin of ferromagnetism in pure and ion doped pyrite FeS_2 nanoparticles, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 256(10), 1900201 (2019).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,504, IF 1,481

doi: 10.1002/pssb.201900201

Резюме:

Теоретично е доказано, че намагнитеността на FeS_2 наночастици се дължи на появата на серни ваканции на повърхността, където FeS_2 претърпява редукция до FeS . Тази промяна е придружена от преход от нулева спинова конфигурация на Fe^{2+} йони към такива със спин $S = 2$. Освен това, има некомпенсирани Fe спинове на повърхността. Поради това се наблюдава ферромагнетизъм, който се описва с помощта на модела на Хайзенберг. Приложеният метод на функциите на Грийн позволява изчисляване на зависимостта на намагнитеността на FeS_2 наночастици от концентрацията на FeS на повърхността при крайна температура и различни размери на частиците. Установено е увеличаване на намагнитеността на FeS_2 наночастиците с намаляване на размера им. Показано е, че дотирането с Co йони може да индуцира ферромагнетизъм в обемния FeS_2 и наночастици.

Г7.22. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Dielectric Properties in Transition Metal and Rare-Earth-Doped Multiferroic BaTiO₃ Nanoparticles, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 257(9), 2000046 (2020). ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,51, IF 1,710 doi: 10.1002/pssb.202000046

Резюме:

С помощта на микроскопични модели и техниката на функциите на Грийн се изследва зависимостта на реалната част на диелектричната функция ϵ' за BaTiO₃ обемни образци и наночастици от температурата, степента на дотиране с Fe и Eg йони, размера и магнитното поле. Fe йоните заместват Ti йоните и причиняват напрежение на разтягане. Максималната стойност на ϵ' и температурата на фероелектричния фазов преход T_C намаляват с увеличаване на концентрацията на дотиращите Fe йони. Освен това, ϵ' намалява с намаляване на размера на частиците и се увеличава с увеличаване на външното магнитно поле. Последното е доказателство за силен магнетодиелектричен ефект. При заместване на Ba с Eg йони се появява силно напрежение на свиване. Това причинява увеличаване на максимума на ϵ' и T_C с увеличаване на концентрацията на Eg йони.

Г7.23. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Magnetic field effect on the dielectric properties of rare earth doped multiferroic BiFeO₃, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 513, 167101 (2020). ISSN 0304-8853, Q₂, SJR 0,665, IF 2,993 doi: 10.1016/j.jmmm.2020.167101

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн се изследва зависимостта на диелектричната константа на бариев титанат, дотиран с лантан, от температурата, степента на дотиране и магнитното поле. Наблюдава се аномалия в температурната зависимост на диелектричната константа близо до температурата на Неел. Температурата на Неел и температурата на фероелектричния преход намаляват с увеличаване на степента на дотиране. Зависимостта на диелектричната константа от степента на дотирането показва максимална стойност при 0,15. При малки магнитни полета диелектричната константа се увеличава силно, докато при по-силни тя започва леко да намалява, т.е. съществува критично поле за преход от спирално циклоидално към антиферомагнитно подреждане на спиновете.

Г7.24. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Co, Fe and Ni ion doped CeO₂ nanoparticles for application in magnetic hyperthermia, Journal: Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 124, 114364 (2020). ISSN 1386-9477, Q₂, SJR 0,581, IF 3,382 doi: 10.1016/j.physe.2020.114364

Резюме:

За приложение в магнитна хипертермия (МХТ) магнитните наночастици (НЧ) трябва да имат голяма намагнитеност на насищане M , малко коерцитивно поле H_C , температура на Кюри $T_C \approx 315$ К, размер $d < 20$ nm и биосъвместимост. M е много малка в недотирани CeO₂ НЧ, но дотирането с йони на преходен метал може да повиши намагнитеността на насищане. Увеличаване на M и намаляване на H_C се дължи на увеличаване на кислородните ваканции на повърхността, взаимодействието между Ce³⁺ йони, намиращи се на повърхността, и обменните взаимодействия между Ce йони и йоните на дотиращите елементи Co, Fe, Ni. Използвайки микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн е изчислена самосъгласувано зависимостта на M , H_C и T_C от температурата, размера, формата на НЧ и степента на дотиране в недотирани и дотирани с Co, Fe и Ni CeO₂ НЧ. В заключение, подходящи за приложение в МХТ могат да бъдат Co, Fe и Ni дотирани сферични CeO₂ НЧ с размер $d = 10$ nm и концентрация на дотиране $x = 0.07, 0.05$ и 0.06 , съответно. За тези стойности на x температурата на Кюри е $T_C = 315$ К.

Г7.25. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Multiferroic properties of pure and transition metal doped LaFeO₃ nanoparticles, Physica Status Solidi B: Basic Solid

State Physics 258(2), 2000482 (2020).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₂, SJR 0,51, IF 1,710

doi: 10.1002/pssb.202000482

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел са изследвани зависимостите на намагнитеността M и реалната част на диелектричната функция ϵ' от размера, степента на дотиране и магнитното поле в дотирани $\text{LaFe}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ наночастици (НЧ). Въпреки че M се увеличава, ϵ' намалява с намаляване на размера на НЧ в недотиран LaFeO_3 . Дотирането с различни йони поражда различно напрежение (на свиване или разтягане), което променя обменното взаимодействие. Като следствие, M и ϵ' нарастват с увеличаване на дотирането с Mn или Zn йони, докато и двете величини намаляват при дотиране с Ti или Al йони. Магнетодиелектричният коефициент нараства с прилагане на външно магнитно поле и увеличаване на степента на дотиране с Mn в LaFeO_3 . Това показва, че недотираните и дотирани LaFeO_3 НЧ проявяват мултифероично поведение. Предлага се микроскопичен модел за изследване на мултифероични $\text{Bi}_2\text{NiMnO}_6$ тънки филми.

Г7.26. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Multiferroic and phonon properties of pure and ion doped CoCr_2O_4 - bulk and nanoparticles, Journal of Alloys and Compounds 852, 156885 (2021). ISSN 0925-8388, Q₁, SJR 1,027, IF 6,371 doi:10.1016/j.jallcom.2020.156885

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел, са изследвани различни свойства на недотирани и йонно дотирани CoCr_2O_4 - обемни образци и наночастици (НЧ). Намагнитеността M_S и температурата на Кюри T_C намаляват с намаляване на размера на частиците. При дотиране с Fe M_S и T_C се увеличават с повишаване на концентрацията на Fe x , докато при дотиране с Mg се получава обратната зависимост. В първия случай има деформация на свиване, във втория - деформация на разтягане, дължаща се на различните радиуси на дотиращите йони спрямо заместваните. Това води до различни константи на обменно взаимодействие в дотирани образци. Поляризацията P_S се увеличава с увеличаване на концентрацията x при дотиране с Fe. Наблюдават се две аномалии в специфичната топлемост C_P , при $T_C = 98$ K и $T_S = 25$ K, които не са толкова отчетливи при прилагане на h . Изследвани са също зависимостта на фононната енергия $\omega_0 = 685$ cm^{-1} и затихването от температурата, магнитното поле, размера и дотирането.

Г7.27. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Differences in the multiferroic properties of AgCrS_2 and AgCrO_2 , Solid State Communications 323, 114119 (2021). ISSN 0038-1098, Q₃, SJR 0,413, IF 1,934 doi: 10.1016/j.ssc.2020.114119

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел, са изследвани мултифероичните свойства на съединението AgCrS_2 , като са отчетени различни обменни взаимодействия в слоевете CrS_2 и между тях, спин-фононни взаимодействия и квадратична магнетоелектрична връзка. За AgCrO_2 се отчита и еднйонната анизотропия. Фероелектричеството в AgCrS_2 може да се обясни с атомни отмествания. Това е геометрично фероелектричество и може да бъде описано чрез напречния модел на Изинг. Поляризацията P има аномалия при T_N , която изчезва при прилагане на магнитно поле h . P в AgCrO_2 е спин-индуцирана, като неколинеарната спирална спинова структура е отговорна за нарушаването на инверсната симетрия, подобно на CuCrO_2 . Произходът на поляризацията в двете съединения са описани с различни модели. P в AgCrO_2 съществува само под T_N и намалява с h . Температурната зависимост и зависимостта на диелектричната константа от магнитното поле са сходни в двете съединения. Фононната енергия и затихването на A_{1g} мода като функция на T и h се изчисляват и сравняват за AgCrS_2 , AgCrO_2 и CuCrO_2 .

Г7.28. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Microscopic theory of the specific absorption rate for self-controlled magnetic hyperthermia, Journal of Magnetism

and Magnetic Materials 522, 167504 (2021).

ISSN 0304-8853, Q₂, SJR 0,606, IF 3,097 doi: 10.1016/j.jmmm.2020.167504

Резюме:

Въпреки усилията на много изследователски екипи, оптимизирането на процеса на термично нагряване с магнитни наночастици, взаимодействащи с променливо магнитно поле, за приложение в самоконтролираща се магнитна хипертермия, остава предизвикателство. Макроскопичните модели, които определят количествено процеса на генериране на топлина, не могат да комбинират изискванията за биосъвместимост на магнитните наночастици в хуманната медицина, от една страна, с високите стойности на коефициента на абсорбирана топлинна мощност (т.нар. SAR коефициент), от друга. За първи път се предлага микроскопичен модел, използващ Кубо формализма, модифициран Хамилтониан на Хайзенберг и метода на функциите на Грийн за изчисляване на абсорбираната мощност (топлинна енергия, абсорбирана от магнитна наночастица за единица време в променливо магнитно поле). От напречна магнитна възприемчивост, елементарна енергия на възбуждане и затихване се изследва SAR коефициента като функция на микроскопичните параметри на системата: константи на обменно взаимодействие и еднородна магнитна анизотропия. Изчисленията са направени за магнитна хетерогенна наночастица, състояща се от ядро, обвивка, междинен слой между тях и повърхност (т.нар. модел ядро/обвивка). Предложеният модел на наночастици позволява за всяка област да се дефинират различни обменни взаимодействия и константи на магнитна анизотропия, както и различни магнитни конфигурации и дебелина. Зависимостта на SAR коефициента от микроскопичните параметри на системата е анализирана и качествено обяснена с поведението на елементарните възбуждания (спинова енергия и затихване). Резултатите са в добро качествено съответствие с експерименталните данни и показват, че с помощта на хетерогенни магнитни наночастици процесите на загряване при хипертермия могат да бъдат максимизирани.

Г7.29. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova and J. M. Wesselinowa, Magnetic and electric properties of multiferroic LiFeP₂O₇. Comparison with LiCrP₂O₇, Modern Physics Letters B 33(09), 2150158 (2021).

ISSN (print) 0217-9849, ISSN (online) 1793-6640, Q₃, SJR 0,343, IF 1,948

doi: 10.1142/S021798492150158X

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн се изследва зависимостта на магнитните и електричните свойства от температурата и магнитното поле за LiFeP₂O₇ (LFPO) и LiCrP₂O₇ (LCPO) образци. Показано е, че LFPO е антиферомагнитен, но притежава слаб феромагнетизъм по оста b , който се дължи на отклонение от антиферомагнитното подреждане. За LCPO такова феромагнитно подреждане по b оста не се наблюдава. В температурната зависимост на електричната поляризация $P_b(T)$ по оста b има аномалия при $T_N = 22$ К, което е косвено доказателство за вътрешен магнетоелектричен ефект в LFPO. Прилагайки външно магнитно поле H_b , поляризацията P_b се увеличава, по-силно при ниски температури, и аномалията при T_N изчезва. За LCPO не се наблюдава аномалия при $T_N = 6$ К. LCPO е полярен, но не е фероелектричен. Може да се обобщи, че липсващите магнетоелектрични свойства в LCPO се дължат на различия в магнитното подреждане в LFPO и LCPO.

Г7.30. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Magnetic, dielectric and optical properties of Al, Mg, Co and Zn ion doped CuCrO₂, Europhysics Letters 133, 47003 (2021). **ISSN (print) 0295-5075, ISSN (online) 1286-4854, Q₂, SJR 0,525, IF 1,958**

doi: 10.1209/0295-5075/133/47003

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн се изследват ефектите на дотиране с Al, Mg, Co и Zn йони върху различни свойства на мултифероичния CuCrO₂. Температурната зависимост на диелектричната константа ϵ'_{ab} показва аномалия близо до T_N . При дотиране с Al йони ϵ'_{ab} намалява, за Co се увеличава, докато за Mg има максимум при $x \sim$

0,1. ϵ'_{ab} намалява с увеличаване на магнитното поле h_{ab} . Намагнитеността M намалява с увеличаване на концентрацията на Al и Zn дотиране, докато при Mg дотиране M има максимум при $x \sim 0,1$. Ширината на забранената зона E_g се увеличава слабо при дотиране с Zn. E_g намалява силно при увеличаване на дотирането с Co и малко с увеличаване на дотирането с Mg, което е в добро количествено съответствие с експерименталните данни.

Г7.31. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov and J. M. Wesselinowa, Multiferroic and phonon properties at the phase transition of $S = 1/2$ chain cuprates NaCu_2O_2 . Comparison with LiCu_2O_2 , Phase Transitions 94(6-8), 527-535 (2021).

ISSN (print) 1029-0338, ISSN (online) 0141-1594, Q₃, SJR 0,282, IF 1,529

doi: 10.1080/01411594.2021.1945059

Резюме:

Теоретично са изследвани мултифероичните свойства на NaCu_2O_2 (NCO) около температурата на фазовия преход T_N . Общата поляризация P е нула без магнитно поле h поради антифероелектричното подреждане, дължащо се на алтернативното подреждане на CuO_2 слоевете с противоположна посока на спиновете спрямо хиралния вектор. При прилагането на h P се увеличава, преминава през максимум и изчезва при T_N . Зависимостта на $P(h)$ от магнитното поле е доказателство, че NCO е мултифероичен. За $h = 0$ няма аномалия в диелектричната константа ϵ' при T_N , което е доказателство за антифероелектричното поведение на съединението. Наблюдава се, че $P(h)$ и $\epsilon'(h)$ в NCO са доста различни в сравнение с тези на LiCu_2O_2 . Около температурата на Неел T_N в NCO се наблюдава аномалия в специфичната топлоемкост и фононната енергия поради силно анхармонично спин-фононно взаимодействие. Тази аномалия изчезва при прилагане на външно магнитно поле h .

Г7.32. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Multiferroic properties of the antiferroelectric-antiferromagnetic $\text{Cu}_9\text{O}_2(\text{SeO}_3)_4\text{Cl}_6$, Physics Letters A 407, 127480 (2021).

ISSN (Print) 0375-9601, ISSN (Online) 1873-2429, Q₂, SJR 0,531, IF 2,707

doi: 10.1016/j.physleta.2021.127480

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел и техника на функциите на Грийн са изследвани наскоро експериментално наблюдаваните мултифероични свойства на антифероелектрик-антиферомагнетика - $\text{Cu}_9\text{O}_2(\text{SeO}_3)_4\text{Cl}_6$. Поляризацията на подрешетката се увеличава с намаляване на температурата и увеличаване на магнитното поле h . За общата поляризация, която е нула без електрическо поле E , се наблюдава двойна хистерезисна бримка. Диелектричната константа показва две аномалии при двете температури на преход T_N и T_E . Магнетодиелектричното взаимодействие се увеличава с увеличаване на магнитното поле под T_N . Показано е, че при голям коефициент на магнетоелектрична връзка $g(E=0)$ или силно външно електрическо поле E ($g = \text{const}$) в това съединение се индуцира слаб феромагнетизъм. По аналогия $g(h=0)$ или външно магнитно поле h ($g = \text{const}$) може да доведе до слабо фероелектричество.

Г7.33. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, S. Trimper and J. M. Wesselinowa, Dielectric properties of relaxor CuCrO_2 at room temperature, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 258(10), 2100136 (2021).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₃, SJR 0,414, IF 1,782

doi: 10.1002/pssb.202100136

Резюме:

Диелектричните свойства на обемни образци и тънки филми от CuCrO_2 се изследват чрез диелектричната функция ϵ . В допълнение към малкия пик близо до температурата на Неел T_N , се открива вторичен широк пик при високи температури около $T_m = 450 \text{ K} \gg T_N$. Максималната температура T_m нараства с нарастване на честота. Реалната част на ϵ намалява с увеличаване на магнитното поле h и пикът при T_N изчезва. Вторичният пик става по-малък и се разширява с

увеличаване на магнитното поле. ϵ нараства с увеличаване на дебелината на филма. Близко до T_m диелектричната функция има критично поведение, изразено чрез критичния показател $\gamma = 1,74$. Използвайки аргументи за мащабиране, се извеждат критичните показатели $\beta = 0,13$ и $\delta = 13,38$. Показателите зависят от дебелината на филма. Докато β нараства, показателят γ намалява с увеличаване на дебелината на филма.

Г7.34. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Multiferroic and phonon properties near the phase transitions of pure and ion doped $\text{Ca}_3\text{Mn}_2\text{O}_7$, Phase Transitions 94(10), 705-714 (2021).

ISSN (print) 1029-0338, ISSN (online) 0141-1594, Q3, SJR 0,282, IF 1,529

doi: 10.1080/01411594.2021.1966003

Резюме:

Магнитните, диелектричните и фононните свойства на $\text{Ca}_3\text{Mn}_2\text{O}_7$ се изследват с помощта на микроскопичен модел и техниката на функциите на Грийн. Наблюдава се електрически индуцирано намаляване на намагнитеността M , което е косвено доказателство, че $\text{Ca}_3\text{Mn}_2\text{O}_7$ е мултифероичен материал. Диелектричната функция ϵ' има аномалия при температурата на Неел T_N и широк пик при температурата на Кюри T_C . ϵ' нараства с увеличаване на магнитното поле. M и T_N се увеличават при дотиране с Li йони, докато те намаляват при дотиране с Ti йони. Причината е възникване на различни напрежения, дължащи се на дотиращите йони, които променя константите на обменното взаимодействие. T_C се увеличава с увеличаване на концентрацията на Ti. Изследвана е зависимостта на фононната енергия и затихване от температурата и магнитното поле за модата $A_1 \omega_0 = 624 \text{ cm}^{-1}$. И двете величини имат аномалия при T_N поради силното спин-фононно взаимодействие. Аномалията изчезва при прилагане на магнитно поле.

Г7.35. Iliana Apostolova, Angel Apostolov, J. M. Wesselinowa, Phonon and optical properties of transition metal and rare earth ion doped BaTiO_3 , Journal of Applied Physics 130(17), 175103 (2021).

ISSN (print) 1089-7550, ISSN (online) 0021-8979, Q2, SJR 0,668, IF 2,877

doi: 10.1063/5.0069464

Резюме:

Използвайки микроскопичен модел са пресметнати фононната енергия и затихването на $\omega_0 = 264 \text{ cm}^{-1}$ в Fe, Mn и Dy дотиран BaTiO_3 образец. При дотиране с Fe йони, фононната енергия ω и затихването γ показват аномалии при двете температури на фазов преход. ω се увеличава, докато γ намалява с увеличаването на магнитното поле, като аномалията изчезва при T_C^{fm} . ω и T_C^{fe} намаляват или се увеличават съответно с увеличаването на концентрацията на дотиращите Mn или Fe йони. T_C^{fe} и ω за $\omega_0 = 718 \text{ cm}^{-1}$ намаляват с увеличаването на йонното дотиране с Dy на мястото на Ba. γ нараства при дотиране и с трите вида йони. Промените в свойствата на фононите при йонно дотиране се дължат на възникване на различни напрежения, причинени от различните йонни радиуси на заместваните и дотиращите йони. Ефектите от Fe, Mn и Sm дотиране върху ширината на забранената зона също се обсъждат.

Г7.36. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Application of ion doped $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ nanoparticles for self-controlling magnetic hyperthermia, Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 259(3), 2100545 (2022).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q3, SJR 0,401, IF 1,6

doi: 10.1002/pssb.202100545

Резюме:

Изследвани са дотирани наночастици (НЧ) от итриев гранат (YIG) $\text{Y}_3[\text{Fe}_{2-y}\text{M}_y]_a(\text{Fe}_{3-z}\text{M}_z)_d\text{O}_{12}$ ($M = \text{Al, Ga, Sc}$ са немагнитни йони), подходящи за самоконтролираща се магнитна хипертермия (СМХТ) за *in vivo* и *in vitro* приложения. Микроскопичен модел (модифициран Хамилтониан на Хайзенберг) и техниката на функциите на Грийн се използват за изследване на зависимостта на

температурата на магнитния фазов преход, намагнитеността на насищане, коерцитивността и коефициента на арсорбирана топлинна мощност (т.нар. SAR коефициент) от температурата, дотирането и размера, за да се изпълнят условията за магнитна хипертермия. Открит е набор от дотирани YIG магнитни НЧ от итриев гранат, които са подходящи за приложения в медицината за лечение на рак. Предлагат се две дотирани с Sc YIG НЧ, които са най-добрите кандидати за CMXT с $x = 1,08$, $d = 27,5$ nm и $SAR_{max} = 13,52$ W g⁻¹, както и $x = 1,10$, $d = 29,7$ nm и $SAR_{max} = 15,44$ W g⁻¹, за които условията за биосъвместимост и максимизиране на SAR са изпълнени едновременно. Освен това са открити и дотирани с Al и Ga YIG НЧ, които могат да се прилагат за магнитна хипертермия, но с по-малка SAR ефективност.

Г7.37. А. Т. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Magnetic, electric and optical properties of ion doped CuCr₂O₄ nanoparticles, Magnetochemistry 8, 122 (2022). ISSN 2312-7481, Q₂, SJR 0,42, IF 2,7 doi: 10.3390/magnetochemistry8100122

Резюме:

Теоретично се изследват магнитните, електричните и оптичните свойства на недотирани и йонно дотирани CuCr₂O₄ - обемни образци и наночастици. Намагнитеността M_S и ширината на забранената зона E_g намаляват с увеличаване на размера на частиците. При дотиране с йони на Co M_S и поляризацията P показват максимум, докато при йонно дотиране с Pr те намаляват с увеличаване на степента на дотиране. Диелектричната константа намалява при увеличаване на дотирането с Pr. Показано е, че разликата между радиусите на дотиращите и заместваните йони води до появата на напрежение на свиване или разтягане и до различни константи на обменно взаимодействие. E_g намалява при дотиране с Co, докато при дотиране с Pr се увеличава.

Г7.38. I. N. Apostolova, A. T. Apostolov, J. M. Wesselinowa, Size and ion doping effects on magnetic, optical and phonon properties of CuAlO₂, Magnetochemistry 8, 169 (2022). ISSN 2312-7481, Q₂, SJR 0,42, IF 2,7 doi: 10.3390/magnetochemistry8120169

Резюме:

Теоретично са изследвани магнитните, оптичните и фононните свойства на наночастици от CuAlO₂, дотирани с йони заместващи Cu или Al. Феромагнетизмът при стайна температура в наночастиците CuAlO₂ може да се дължи на повърхността, размера и ефектите на дотиране. Намагнитването се увеличава с намаляването на размера на наночастиците. Различните радиуси на дотиращия йон на преходния метал и замествания Cu йон водят до възникване на напрежение на свиване, до увеличаване на константите на обменното взаимодействие и до повишена намагнитеност M_S и температура на Кюри T_C . При заместване с Mn или Cr на Al се наблюдава напрежение на разтягане и намаляване на M_S . Влиянието на размера и йонното дотиране върху ширината на забранената зона също се обсъждат. Фононната енергия ω намалява, докато фононното затихване γ се увеличава с повишаване на температурата и намаляване на размера на наночастиците. Двете величини имат аномалия около $T_C \sim 400$ K. Изследвано е поведението на ω и γ при различно йонно дотиране.

Г7.39. Пiana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Magnetic, phonon and optical properties of transition metal and rare earth ion doped ZnS nanoparticles, Nanomaterials 13, 79 (2023). ISSN 2079-4991, Q₁, SJR 0,81, IF 5,3(2022) doi: 10.3390/nano13010079

Резюме:

С помощта на теорията на функциите на Грийн са изследвани повърхностните, размерните ефекти и ефектите на дотиране върху магнитните, фононните и оптичните свойства на ZnS наночастиците, въз основа на s-d модела, включващ спин-фононно и Кулоново взаимодействие. Промените в свойствата се обясняват на микроскопично ниво и се дължат на различните радиуси на дотиращите и заместваните йони, което води до възникване на напрежения (на свиване или разтягане) и промяна на константите на обменното взаимодействие в нашия модел. Намагнитеността нараства с увеличаване на степента на дотиране с йони на преходни метали (ПМ) и редкоземни елементи (РЕ), които имат радиуси по-малки от радиуса на замествания йон.

При дотиране с с йони на ПМ по-големи от Zn йони намагнитеността намалява. Фотонните енергии се увеличават с увеличаване на размера на дотиращите йоните на ПМ, докато намаляват с увеличаване на размера на РЕ йони. Затихването на фоните се увеличава за всички случаи на дотиране. Изследвани са и промените в ширината на забранената зона при различни концентрации на йонно дотиране. Промените в ширината на забранената зона в дотираните полупроводници могат да се дължат на обменни, s-d, кулонови и електрон-фононни взаимодействия. Направен е опит да се изяснят противоречията, които се съобщават в литературата, за намагнитеността и ширината на забранената зона.

**Г7.40. Пiana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Band Gap Tuning in Transition Metal and Rare-Earth-Ion-Doped TiO₂, CeO₂, and SnO₂ Nanoparticles, Nanomaterials 13, 145 (2023). ISSN 2079-4991, Q₁, SJR 0,81, IF 5,3(2022)
doi: 10.3390/nano13010145**

Резюме:

Енергетичната разлика E_g между валентната и проводимата зона е ключова характеристика за полупроводниците. Някои полупроводници, например TiO₂, SnO₂ и CeO₂, имат относително широка забранена зона, което позволява на материала да поглъща само ултравиолетова светлина. Използвайки s-d микроскопичния модел и метода на функциите на Грийн, са показани две възможности за намаляване на ширината на забранената зона - намаляване на размера на наночастиците и/или дотиране с йони на преходни метали (Co, Fe, Mn и Cu) или йони на редкоземни метали (Sm, Tb и Er). Появяват се различни деформации, които водят до промени в константите на обменно взаимодействие, и по този начин до намаляване на E_g . Освен това е показано значението на s-d взаимодействието, което е причина за наличието на феромагнетизъм при стайна температура и промяна на ширината на забранената зона в дотирани магнитни полупроводници. Направен е опит за изясняване на някои несъответствия в експерименталните данни.

**Г7.41. A. T. Apostolov, I. N. Apostolova, J. M. Wesselinowa, Differences between the multiferroic properties of hexagonal and orthorhombic ion doped YFeO₃ nanoparticles, International Journal of Modern Physics B 37(21), 2350201 (13 pages) (2023). ISSN (Print) 0217-9792, ISSN (Online) 1793-6578, Q₃, SJR 0,27, IF 1,7(2022)
doi: 10.1142/S0217979223502016**

Резюме:

Мултифероичните свойства на йонно дотирани хексагонални (h) и орторомбични (o) YFeO₃ (YFO) наночастици (НЧ) са теоретично изследвани. Намагнитеността M_S в h-YFO НЧ се увеличава, докато за o-YFO НЧ тя намалява с намаляване на размера на НЧ. В диелектричната константа (ДК) при h- и o-YFO НЧ има пик около $T_{C1} \sim 450$ и 460 К, съответно. Само в h-YFO НЧ се появява аномалия в ДК и поляризацията при $T_{C2} \sim 300$ К, която може да бъде свързана с възможен P_{63mc}-P_{63cm} фазов преход. Поляризацията в недотирани и Bi-дотирани o-YFO НЧ се увеличава с увеличаване на магнитното поле. $M_S(x)$ се изследва при дотиране на o-YFO НЧ с Ti⁴⁺ йони, които заемат октаедричните Fe³⁺ места. $M_S(T)$ в недотирани YFO НЧ има малка аномалия при $T_{C1} \sim 450$ К, докато в дотирания YFO тя е при ~ 480 К. При различно йонно дотиране в Y или Fe местата в YFO НЧ се появява трансформация от h- към o-фазата или обратното. В Mn-дотиран o-YFO се появява спин-преориентационен преход. Ширината на забранената зона на h-YFO НЧ е по-малка в сравнение с тази на o-YFO НЧ.

**Г7.42. Пiana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Magnetic, optical and phonon properties of ion doped MgO nanoparticles. Application for magnetic hyperthermia, Materials 16, 2353 (2023). ISSN 19961944, Q₂, SJR 0,56, IF 3,4(2022)
doi: 10.3390/ma16062353**

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел се изследва влиянието на размера и ефектите на дотиране

върху намагнитеността M , фононната енергия ω и ширината на забранената зона E_g на MgO наночастиците. Феромагнетизмът при стайна температура се дължи на повърхностни ефекти и/или ефекти на дотиране в MgO наночастиците (НЧ). Обсъжда се влиянието на спин-фононното взаимодействие. M се увеличава с намаляване на размера на НЧ. M и E_g могат да се увеличат или намалят при дотиране с различни йони (Co, Al, La, Fe) поради деформацията, което се появява. Тя променя параметрите на решетката и константите на обменното взаимодействие. Показано е, че MgO НЧ с размер 20 nm и Fe- или Co-дотиране с концентрация $x = 0.1$ и $x = 0.2$, съответно, имат температура на Кюри $T_C = 315$ K, т.е. те са подходящи за приложение при магнитна хипертермия защото удовлетворяват необходимите условия. Енергията на фононния мод $\omega = 448 \text{ cm}^{-1}$ нараства с намаляване на размера на НЧ. Енергията се увеличава с увеличаване на Co и Fe дотиране или намалява при дотиране със Sr йони.

Г7.43. Iliana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Comparison of the multiferroic properties of ion doped hexagonal LuFeO₃ and LaFeO₃ Physica Status Solidi B: Basic Solid State Physics 260(7), 2300077 (2023).

ISSN (Print) 0370-1972, ISSN (Online) 1521-3951, Q₃, SJR 0,401, IF 1,6(2022)

doi: 10.1002/pssb.202300077

Резюме:

С помощта на микроскопичен модел се изследват магнитните и електричните свойства на недотиран и йонно дотиран (на Lu или Fe места) хексагонал LuFeO₃ (LuFO) и се сравняват със свойствата на йонно дотиран LaFeO₃ (LaFO). Намагнитеността се увеличава при дотиране със Sr или Sc поради възникване на деформация и промяна на константите на обменното взаимодействие в дотираните състояния. При Sm дотиране на LuFO поляризацията намалява, докато при Sm дотиране на LaFO поляризацията нараства с увеличаване на концентрацията на Sm. При Ir или Co йонно дотиране (йоните заемат местата на Fe), намагнитеността и фононната енергия се увеличават, докато ширината на забранената зона намалява. При дотиране с един и същи йон, който заема местата на Fe, например Sc, няма разлики в поведението на LuFO и LaFO. Наблюдава се добро съответствие с експерименталните данни. Ефектите на дотиране могат да се използват за различни приложения.

Г7.44. Iliana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Band gap energy of ion doped multiferroic NaFeO₂ nanoparticles, Physica Status Solidi (RRL) - Rapid Research Letters 2300159 (2023).

ISSN (Print) 1862-6254, ISSN (Online), 1862-6270, Q₂, SJR 0,73, IF 2,8(2022)

doi: 10.1002/pssr.202300159

Резюме:

Енергията на забранената зона E_g в орторомбични β - и хексагонални α -NaFeO₂ обемни образци и наночастици е изследвана за първи път въз основа на микроскопичен модел, комбиниран с теорията на функциите на Грийн. E_g нараства с намаляване на размера на наночастиците и зависи от тяхната форма. Демонстрирана е конкуренция между кулоновите и електрон-фононните взаимодействия. Освен това, E_g намалява с увеличаване на степента на дотиране с Ge и Si или се увеличава при дотиране с Mn, Sr и Ni йони поради различни радиуси на дотиращите и заместените Fe йони, което води до възникване на различни деформации. Заместването на Na йон с K или Li(Cu) йони може да причини както повишаване, така и намаляване на E_g . По този начин ширината на забранената зона може да се регулира чрез промяна размера на наночастиците, йонното дотиране, електрон-фононните и кулоновите взаимодействия.

Г7.45. Iliana Naumova Apostolova, Angel Todorov Apostolov, Julia Mihailova Wesselinowa, Magnetoelectric coupling effects in Tb doped BiFeO₃ nanoparticles, Magnetochemistry 9, 142 (2023). ISSN 2312-7481, Q₂, SJR 0,42, IF 2,7(2022)

doi: 10.3390/magnetochemistry9060142

Резюме:

Магнитните, електричните и оптичните свойства на BiFeO_3 наночастици, дотирани с Tb, като функции на размера и степента на дотиране са изследвани с помощта на микроскопичен модел. Отчита се както линейна, така и квадратична магнетоелектрична (МЕ) връзка. Наблюдават се подобрени мултифероични свойства и регулиране на ширината на забранената зона. Намагнитеността и поляризацията се увеличават с намаления размер на наночастиците и увеличаване на дотирането с Tb x . Температурата на Неел остава почти непроменена, докато температурата на Кюри намалява с увеличаване на x . Наблюдава се МЕ връзка, предизвикана от дотирането. Диелектричната константа се изследва като функция на размера, дотирането и магнитното поле. Ширината на забранената зона намалява с намаляване на размера на наночастиците или увеличаване степента на дотиране с Tb поради конкуриращи се ефекти на напрежение на свиване, кислородни ваканции на повърхността и Кулонови взаимодействия. Увеличаването на дотирането с Tb и намаляването на размера на наночастиците усилва МЕ ефект.

Г7.46. Iliana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Size and doping effects on the magnetic and electric properties of $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ nanoparticles, European Physical Journal B 96, Article number: 77 (2023).

ISSN (Print) 1434-6028, ISSN (Online) 1434-6036, Q₃, SJR 0,379, IF 1,6(2022)

doi: 10.1140/epjb/s10051-023-00550-x

Резюме:

В настоящата статия е предложен микроскопичен модел за изследване на мултифероичните свойства на $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ наночастиците. Спонтанната намагнитеност M_S се увеличава с намаляване на размера на наночастиците. M_S зависи от тяхната форма. Тя е по-голяма за цилиндрични, отколкото за сферични наночастици. M_S се увеличава с увеличаване на концентрацията на Co и Ho, докато при дотиране с Mn намалява. Тези регулируеми магнитни свойства могат да бъдат широко приложени в спинтрониката. Поляризацията P_S също се увеличава с намаляване на размера на наночастиците. Дотирането с Mn йони води до повишаване на P_S , температурата на фазов преход T_C и диелектричната константа и по този начин подобрява електричните и диелектрични свойства на $\text{Bi}_2\text{Fe}_4\text{O}_9$ наночастиците. При прилагане на външно магнитно поле P_S се увеличава, което е косвено доказателство за силна магнетоелектрична връзка. Специфичната топлемост C_P показва аномалия при температурата на Неел T_N , която изчезва чрез прилагане на външно магнитно поле. Ширината на забранената зона E_G намалява при увеличаване на дотирането с Ti, Co и Ho, докато при дотиране с Mn E_G нараства.

Г7.47. Iliana Apostolova, Angel Apostolov and Julia Wesselinowa, Magnetic properties of Gd-Doped Fe_3O_4 nanoparticles, Applied Sciences 13(11), 6411 (2023).

ISSN 2076-3417, Q₂, SJR 0,49, IF 2,7(2022) doi: 10.3390/app13116411

Резюме:

Магнитните свойства на Fe_3O_4 наночастици, недотирани и дотирани с редкоземни йони, са изследвани с помощта на микроскопичен модел и теорията на функциите на Грийн. Намагнитеността M_S и температурата на Кюри T_C се изчисляват в зависимост от размера, температурата и степента на дотиране с Gd. M_S и T_C намаляват с намаляване на размера на наночастиците и с увеличаване на степента на дотиране. Ширината на забранената зона се увеличава с намаляване на размера на наночастиците и увеличаване на дотирането с Gd. Получените резултати са в добро съответствие с експерименталните данни.

E19. Публикуван университетски учебник или учебник, който се използва в училищната мрежа.

E19.1. И. Апостолова, А. Апостолов, Физика с биофизика, Издателство „Авангард прима”, ISBN 978-619-160-677-1, 323 стр., София (2016).

Резюме:

Учебникът е написан по лекционния курс „Физика с основи на биофизика“ за студентите от специалността Ветеринарна медицина на ЛТУ. Обединението в един курс на части от общата физика и биофизиката наложи да се подберат такива физични теми, които са тясно свързани с медицината, както и да се разгледат само части от биофизиката (молекулна биофизика и биофизика на клетката). Учебният материал е систематизиран в осем части: Акустика и биоакустика, Молекулна физика и термодинамика на биологичните системи, Електричество и магнетизъм, Оптика, Биологични и изкуствени мембрани, Транспорт на веществата през биомембрани, Електрични свойства на клетки и тъкани и Биопотенциали. В първата част на учебника са представени по-традиционни физични теми, като в края на всяка от тях е показана връзката ѝ с процесите, протичащи в живите организми. Разгледани са основни методи за образна диагностика - ехография, термография и магнитно-резонансната томография. Втората част на учебника е изцяло биофизична, като целенасочено се търси връзка с физиологията, биохимията и молекулярната биология.

E19.2. И. Апостолова, Физика с биофизика за еколози, Издателство „Авангард прима”, ISBN 978-619-239-896-5, 373 стр., София (2023).

Резюме:

Учебникът е написан по лекционния курс „Физика с биофизика“ за студентите от специалност Екология и опазване на околната среда на ЛТУ. В него са разгледани основни идеи и методи на физиката и биофизиката, като е отделено внимание на физичната страна на явленията и закономерностите, свързани с опазването на природата и климата. Учебният материал е систематизиран в шест части: Видове движения. Механични трептения и вълни; Видове взаимодействия. Електрично и магнитно поле; Термодинамика и молекулна физика. Преобразуване на енергията в биологичните системи; Клетъчна мембрана и транспорт на веществата; Електрични и магнитни свойства на веществата. Електрични свойства на тъканите и Електромагнитни и корпускулярни лъчения и взаимодействието им с веществата. В учебника са избрани теми, които са подходящи в работата и по-нататъшното обучение на бъдещите еколози, спомагат за формиране на точно мислене, прецизност и вникване в същността на природните явления. Дискутирани са от физична гледна точка теми, свързани с аерийоните, тяхното биологично действие и последствията от нарушаването на йонния баланс, парниковият ефект и промяната на климата, озоновата дупка и влиянието ѝ върху живите организми, водещо до нарушаването на равновесието в екосистемите. Особено внимание е обърнато на естествените и техногенните източници на йонизиращи корпускулярни и фотонни лъчения и принципите, на които се основава защитата от тях. Разгледано е биологичното действие на йонизиращите лъчения и причинените от тях детерминирани и стохастични увреждания, дози и дозово натоварване. В отделните теми са разгледани накратко основни физични методи за качествено и количествено определяне на химичния състав на веществата и възможност за наблюдаване на различни биологични обекти.

E20. Публикувано университетско учебно пособие или учебно пособие, което се използва в училищната мрежа.

E20.1. И. Апостолова, Тестове по Физика и Физика с биофизика за студентите от Лесотехнически университет, Издателство „Авангард прима”, ISBN 978-619-239-712-8, 144 стр., София, (2022).

Резюме:

Помагалото е предназначено за всички студенти от ЛТУ, които изучават дисциплините „Физика“ - Горско стопанство, Технология на дървесината и мебелите, Инженерен дизайн,

Компютърни технологии в мебелната промишленост и „Физика с биофизика“ - Ветеринарна медицина, Екология и опазване на околната сред, Агрономство и Растителна защита. Целта му е да се стимулират студентите за усвояване на повече знания през учебния семестър, а не само да разчитат на сесията. Това може да стане чрез подходящ и обективен текущ контрол върху лабораторните упражнения по време на семестър, като резултатите от него участват с достатъчна тежест при формирането на крайната оценка на изпитите по „Физика“ и „Физика с биофизика“. Тестовете са разработени въз основа на „Ръководството за лабораторни упражнения по физика и биофизика“ на ЛТУ. Всеки тест съдържа множество отворени и затворени въпроси. Помагалото може да се използва както за самоподготовка от студентите, така и от останалите ми колеги физици за осъществяване на текущ контрол.

януари 2024 г.

Изготвил: 
/доц. д-р Илиана Апостолова/