**Синтез и мессбауэровское исследование перовскитоподобного**

**оксида La2Li0.5Ni0.5O4, допированного зондовыми атомами 57Fe**

***Олейниченко К.Н., Асландукова А.А.***

*Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*Факультет наук о материалах, Москва, Россия*

*E-mail: oleinichenko.he@yandex.ru*

Соединения класса K2NiF4 привлекают особый интерес благодаря разнообразию проявляемых ими физических свойств. Например, в веществах типа La2Li0.5*M*0.5O4 (*M*=Cu, Co, Ni) наблюдаются такие физические явления, как зарядовый перенос, спин-кроссовер и нестандартные типы магнитного упорядочения. Данные процессы, в большинстве случаев, имеют динамический характер, поэтому привлечение такого локального метода исследований, как мессбауэровская спектроскопия (МС), позволяет получить более чёткую картину протекания интересующих нас процессов.

Однофазный образец La2(Li0.5Ni0.5)0.9957Fe0.01O4 был получен твердофазным методом синтеза из оксидов соответствующих элементов путем многократного высокотемпературного отжига в токе кислорода. Чистота соединения контролировалась методами рентгенофазового анализа и МС. Отсутствие в полученных МС спектрах линий зеемановского секстета позволило исключить выделение зондов 57Feв виде собственной оксидной фазы, поскольку все известные оксиды железа (III) при комнатной температуре являются магнитоупорядоченными соединениями (например, Fe2O3 (*T*N = 950K)).

В работе представлены результаты мессбауэровского исследования на зондовых атомах 57Fe соединения La2Li0.5Ni0.5O4 в широком диапазоне температур 15-300К. На основании анализа экспериментальных данных было установлено электронное состояние и локальное окружение зондовых атомов в позициях [LiO6] и [NiO6].

Ранее для изоструктурного соединения La2Li0.5Cu0.5O4:57Fe нами было показано, что зонды, находящиеся в позициях катионов меди 57Fe(→Сu), окисляются до Fe4+ в результате сильного тетрагонального искажения и анизотропии химических связей в полиэдрах [FeO6]. Присутствие катионов Fe4+ было подтверждено методом МС. Характер температурного изменения профиля данной компоненты исключает возможность ее описания в рамках статичной модели. Анализ литературы по структурным исследованиям La2Li0.5Ni0.5O4 показал, что шахматный порядок катионов никеля и лития присутствует только в 75% случаев. Вследствие чего, для массива зондовых атомов возможно нарушение идеального окружения, что может внести изменения в процесс окисления Fe3+ → Fe4+ в позициях никеля и привести к изменению относительной концентрации состояния Fe4+. Для установления электронного состояния зондов в позициях 57Fe(→Li) были проведены теоретические расчеты в рамках теории кристаллического поля, а также проанализированы данные оптической спектроскопии. Исходя из полученной информации, мы предположили наличие динамического процесса - непрерывного температурно- и временно зависимого спинового кроссовера, в ходе которого происходит стабилизация зондовых атомов 57Fe в позициях лития в конфигурации с промежуточным значением спина IS (*S* = 3/2). С учётом данного предположения, МС спектры были описаны в рамках модели, содержащей две двухуровневые релаксационные компоненты, характеризующие динамические процессы Fe3+(IS) ↔ Fe3+(HS) и Fe4+(HS) ↔ Fe3+(IS).

Использование данной полной релаксационной модели обработки позволило проинтерпретировать мессбауэровские спектры в широком диапазоне температур 15 - 300К. На основании полученных данных было прослежено температурное поведение динамики спинового кроссовера Fe3+(HS) ↔ Fe3+(IS). Было показано, что повышение температуры приводит к увеличению заселенности состояния железа с промежуточным значением спина для процесса Fe3+ (IS) ↔ Fe4+, и в высокоспиновом состоянии для процесса Fe3+(IS)↔ Fe3+(HS), что подтверждает данные теоретически расчетов.