

Канутр Илья Эдуардович, Радзивончик Данил Игоревич

Спиновое и зарядовое состояния ионов железа в ферритах бария по данным рентгеновской эмиссионной и абсорбционной спектроскопии

Цели и задачи проекта:

Оценка спинового и зарядового состояний ионов железа в ферритах BaFe_2O_4 , $\text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ и $\text{Ba}_3\text{Fe}_2\text{O}_6$ методами рентгеновской эмиссионной и абсорбционной спектроскопии.

Задачи:

- Измерить рентгеновские эмиссионные спектры (XES) $K\alpha_{1,2}$ и $K\beta_{1,3}$ ионов железа в ферритах BaFe_2O_4 , $\text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ и $\text{Ba}_3\text{Fe}_2\text{O}_6$.
- Выполнить анализ полученных спектров XES $K\alpha_{1,2}$ и $K\beta_{1,3}$, на основе известных методов, позволяющих сделать оценку спинового и зарядового состояний ионов по характеристикам кривой спектра.
- Измерить спектры рентгеновского поглощения (XAS) на $L_{2,3}$ крае железа с использованием источника синхротронного излучения.
- Выполнить моделирование спектров XES $K\alpha_{1,2}$, $K\beta_{1,3}$ и XAS L-края ионов железа с использованием мультиплетного подхода. Оценить спиновое и зарядовое состояния ионов железа на основе сопоставления экспериментальных спектров XES $K\alpha_{1,2}$, $K\beta_{1,3}$ и XAS L-края железа и соответствующих теоретических спектров.

Ожидаемые результаты:

- 1) Получены рентгеновские эмиссионные спектры (X-ray emission spectroscopy - XES) $K\alpha_{1,2}$, $K\beta_{1,3}$ железа в ферритах BaFe_2O_4 , $\text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ и $\text{Ba}_3\text{Fe}_2\text{O}_6$ на флуоресцентном рентгеновском спектрометре и рентгеновские спектры поглощения (XAS - X-ray absorption spectroscopy) $L_{2,3}$ крае железа, измеренные с использованием синхротронного излучения.
- 2) Выполнена оценка спинового и зарядового состояний ионов железа в BaFe_2O_4 , $\text{Ba}_2\text{Fe}_2\text{O}_5$ и $\text{Ba}_3\text{Fe}_2\text{O}_6$ на основе анализа и моделирования экспериментальных спектров.
- 3) Публикация статьи в журнале, индексируемом в базах данных Web of Science/ Scopus/ РИНЦ и тезисов докладов на конференциях.