

© 1992

МАГНИТНАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ КУПРАТОВ $\text{Re}_2\text{BaCuO}_5$

*И. В. Голосовский, В. П. Плахтий, В. П. Харченков,
Я. Зоубкова, Б. В. Милль, М. Бонне, Е. Рудо*

По результатам нейтронной дифракции на поликристаллических образцах определен магнитный порядок в купратах $\text{Re}_2\text{BaCuO}_5$, где Re — Dy, Ho, Er, Tm и Yb при разных температурах. Получены параметры кристаллической структуры в парамагнитной фазе. Во всех исследованных соединениях наблюдались различные антиферромагнитные структуры, а для $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$ и $\text{Ho}_2\text{BaCuO}_5$ обнаружены спин-переориентационные переходы по температуре.

В последнее время проявляется большое внимание к купратам, входящим в семейство $\text{R}_2\text{O}_3\text{—BaO—CuO}_x$, в частности к соединениям $\text{Re}_2\text{BaCuO}_5$, где Re — редкоземельный элемент. Эти оксиды, которые иногда появляются как включения и высокотемпературные сверхпроводники состава $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$, известны как «зеленая фаза». Их пространственная структура подробно описана [1–4], однако точные координаты измерены только для Y_2BaCuO_5 и $\text{Gd}_2\text{BaCuO}_5$ [3–4].

Интерес к $\text{Re}_2\text{BaCuO}_5$ обусловлен прежде всего наличием двух спиновых систем — меди и редкой земли с существенно различным характером взаимодействия. Сильная анизотропия должна приводить к спинпереориентационным переходам, связанным со взаимной поляризацией спинов 4-*f* и 3*d*-иона, как, например, в ортоферритах [5]. Действительно, исследования восприимчивости и намагниченности показывают несколько последовательных переходов с антиферромагнитным характером упорядочения [6–7].

На настоящее время нам известна единственная работа по определению магнитного упорядочения в таких соединениях методом нейтронной дифракции — в соединении Y_2BaCuO_5 [8]. В ней на основании наблюдения двух слабых рефлексов делается вывод о неколлинеарном упорядочении спинов Cu с двумя волновыми векторами $\mathbf{k} = [0, 0, 1/2]$ и $\mathbf{k} = [1/2, 0, 1/2]$, что весьма необычно.

1. Эксперимент

Однофазные поликристаллические образцы были синтезированы по керамической технологии. Нейтронографические исследования всех образцов, кроме $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$, проводились на многосчетчиковом дифрактометре ЛИЯФ [9]. Измерения $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$ выполнены на дифрактометре реактора СИЛОЭ Центра ядерных исследований в Гренобле. В первом случае длина волны падающих нейтронов была 1.383, во втором — 2.488 Å. Измерения проводились при температурах выше и ниже температуры фазовых переходов в соответствии с [7].

Кристаллическая структура в парамагнитной фазе уточнялась методом профильного анализа (Ритвельда) с помощью программы DBW32SB рамках пространственной группы $R\bar{3}m$. В качестве стартовых мы брали параметры Y_2BaCuO_5

[³]. Уточненные координаты для всех исследуемых соединений сведены в табл. 1. Интенсивность магнитного рассеяния рассчитывалась с помощью модифицированного варианта программы профильного анализа [¹⁰]. При этом использовались полученные координаты. Для форм-фактора редких земель использовалось дипольное приближение [^{11, 12}].

Таблица 1

Относительные координаты и параметры ячейки, полученные из профильного анализа парамагнитной фазы при температуре *T*

	Dy ₂ BaCuO ₅	Ho ₂ BaCuO ₅	Er ₂ BaCuO ₅	Tm ₂ BaCuO ₅	Yb ₂ BaCuO ₅	Y ₂ BaCuO ₅
	T, K					
	25	20	22	22	20	300
<i>a</i> Å	12.1735(15)	12.1489(9)	12.097(1)	12.080(1)	12.0214(7)	12.176(2)
<i>b</i> Å	5.6586(6)	5.6460(4)	5.6305(5)	5.6045(4)	5.5969(3)	5.655(2)
<i>c</i> Å	7.1209(9)	7.1040(5)	7.0778(6)	7.0562(5)	7.0293(4)	7.130(1)
Ba <i>x</i>	0.092(3)	0.0959(6)	0.0962(8)	0.0955(7)	0.0946(5)	0.09520(5)
<i>z</i>	0.069(3)	0.068(1)	0.068(1)	0.070(1)	0.0686(9)	0.06985(9)
Rel <i>x</i>	0.0708(9)	0.0735(4)	0.0737(6)	0.0731(5)	0.0745(3)	0.07382(8)
<i>z</i>	0.3993(12)	0.3960(7)	0.3977(8)	0.3957(8)	0.3978(4)	0.3959(1)
Re2 <i>x</i>	0.2910(7)	0.2880(4)	0.2898(5)	0.2889(5)	0.2888(2)	0.28827(8)
<i>z</i>	0.1191(14)	0.1158(8)	0.1197(9)	0.1156(9)	0.1182(5)	0.1163(1)
Cu <i>x</i>	0.6619(20)	0.6582(5)	0.6585(6)	0.6583(5)	0.6610(4)	0.6595(1)
<i>z</i>	0.7004(26)	0.7113(7)	0.7123(8)	0.7140(7)	0.7122(6)	0.7126(2)
O1 <i>x</i>	0.562(2)	0.5666(4)	0.5659(5)	0.5665(4)	0.5670(4)	0.5681(4)
<i>y</i>	0.523(3)	0.506(1)	0.506(1)	0.503(1)	0.5065(8)	0.5071(1)
<i>z</i>	0.8304(22)	0.8331(5)	0.8335(6)	0.8349(5)	0.8345(4)	0.8345(7)
O2 <i>x</i>	0.7665(13)	0.7736(3)	0.7741(4)	0.7737(3)	0.7726(3)	0.7712(4)
<i>y</i>	0.495(4)	0.505(1)	0.502(1)	0.504(1)	0.5023(9)	0.503(1)
<i>z</i>	0.6499(38)	0.6428(7)	0.6432(8)	0.6415(7)	0.6414(6)	0.6432(7)
O3 <i>x</i>	0.6053(23)	0.6001(6)	0.5994(8)	0.6013(7)	0.6013(5)	0.6000(6)
<i>z</i>	0.428(3)	0.412(1)	0.416(1)	0.415(1)	0.4162(9)	0.422(1)
R _N	6.90	5.41	4.83	4.47	2.92	

* Результаты [³].

2. Магнитное рассеяние

На первом этапе из систематики наблюдаемых магнитных рефлексов были определены векторы распространения магнитных структур, которые приведены в табл. 2.

Для Er₂BaCuO₅, Dy₂BaCuO₅ и Ho₂BaCuO₅ на нейтронограммах магнитного рассеяния (рис. 1, *a*, 2, *a* и 3, *a*), измеренных ниже температуры первого перехода, наблюдается система магнитных рефлексов с полуцелыми индексами *k*. Под нейтронограммой магнитного рассеяния здесь и дальше понимается разность между нейтронограммой, измеренной при данной температуре, и нейтронограммой.

Таблица 2

Векторы распространения магнитных структур

Dy ₂ BaCuO ₅	Ho ₂ BaCuO ₅	Er ₂ BaCuO ₅	Tm ₂ BaCuO ₅	Yb ₂ BaCuO ₅
(12) [0. ₂ ¹ 0]	(10) [0. ₂ ¹ 0]	(8) [0. ₂ ¹ 0]		(8)*
(2) [0.0.0]	(1.3) [0. ₂ ¹ 0] +[0.0.0]	(1.3) [0. ₂ ¹ 0]	(1.3) [0. ₂ ¹ 0]	(1.3) [0. ₂ ¹ ₂ ¹]

* Дальнего магнитного порядка нет. В скобках приведена температура, при которой измерена соответствующая нейтронограмма.

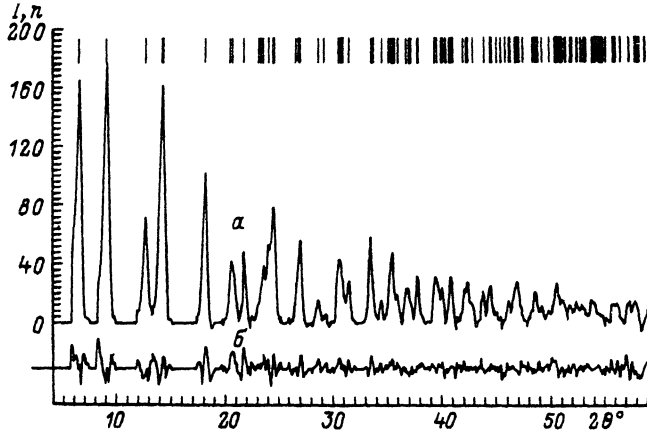


Рис. 1. Нейтронограмма магнитного рассеяния для $\text{Er}_2\text{BaCuO}_2$ при 1.3 К, $k = (0.1/2.0)$.

a — измеренная нейтронограмма, *b* — разность между измеренной и рассчитанной нейтронограммами. Штрихами показано положение магнитных рефлексов. Сильная асимметрия рефлексов на малых углах обусловлена большой апертурой счетчиков.

мой, измеренной в парафазе. Такая система рефлексов соответствует структуре, в которой при трансляции вдоль оси *b* все спины меняют знак. Другими словами, магнитная ячейка получается удвоением химической вдоль оси *b*. Относительные интенсивности рефлексов для всех соединений разные, т. е. направления спинов относительно кристаллографических осей разное.

Для $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$ нейтронограммы при температуре 8 и 1.3 К отличаются только интенсивностью. Это означает, что при фазовом переходе 5 К [7] магнитная структура не претерпевает существенных изменений. Совсем иная картина наблюдается в случае $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$. После перехода 9 К [7] происходит переориентация спинов — возникает новая система магнитных рефлексов, которые

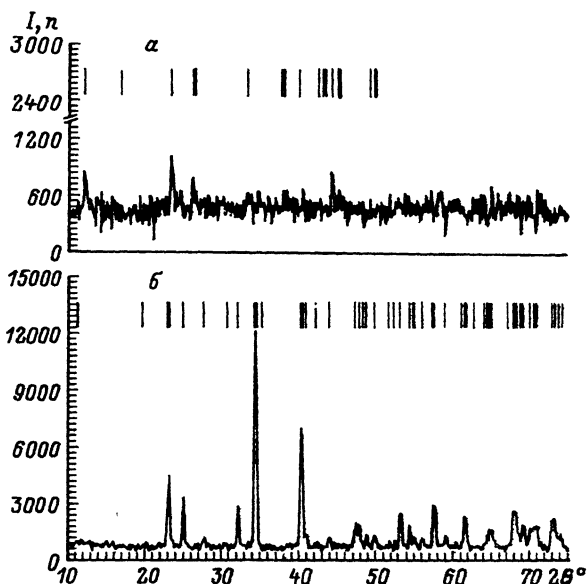


Рис. 2. Измеренные нейтронограммы магнитного рассеяния для $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$.

a — 12 К, $k = (0.1/2.0)$, *b* — 2 К, $k = (0.0/0.0)$. Штрихами показано положение магнитных рефлексов.

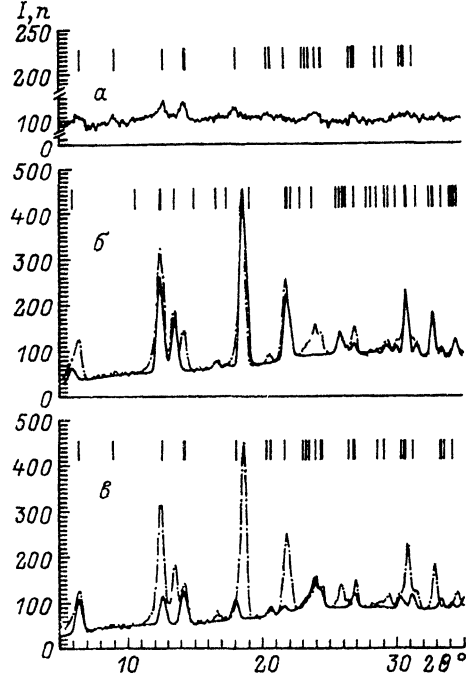


Рис. 3. Нейтронogramмы магнитного рассеяния для $\text{Ho}_2\text{BaCuO}_5$.

a — измеренная при 10 К, $k = (0,1/2,0)$; *б* и *в* — измеренная при 1,3 К (пунктир) и рассчитанные составляющие с двумя векторами распространения ($k = (0,0,0)$ для *б* и $(0,1/2,0)$ для *в*). Штрихами показано положение магнитных рефлексов.

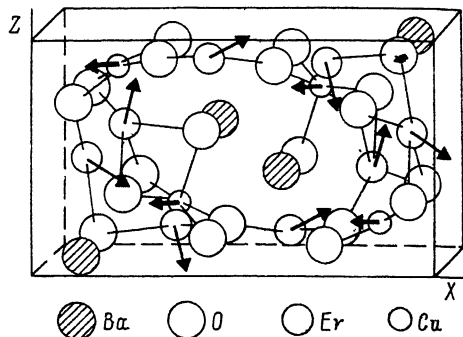


Рис. 4. Магнитная структура $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$ для одной элементарной ячейки. Стрелками показано направление магнитных моментов.

могут быть проиндексированы в химической ячейке (рис. 2, б). Это означает, что направление спинов при всех трансляциях не меняется. Еще более сложная ситуация для $\text{Ho}_2\text{BaCuO}_5$. Магнитный порядок, возникающий после первого перехода, также существенно меняется при дальнейшем понижении температуры.

Нейтронogramма, измеренная ниже температуры второго перехода, содержит две системы рефлексов, одна из которых индексируется в химической ячейке (рис. 3, б), а другая соответствует той же магнитной ячейке, что и выше перехода (рис. 3, в).

Для $\text{Tm}_2\text{BaCuO}_5$ даже при 1,3 К наблюдается только сильное диффузное рассеяние и очень слабый рефлекс $0, 1/2, 0$, по всей вероятности, связанный с упорядочением моментов меди. Для $\text{Yb}_2\text{BaCuO}_5$ магнитный порядок возникает при довольно низких температурах, во всяком случае, не выше 8 К. При 1,3 К на фоне сильного диффузного рассеяния мы наблюдали систему слабых рефлексов, которые могут быть индексируются в ячейке, удвоенной по осям *b* и *c*.

3. Возможные типы магнитного упорядочения

В пространственной группе $R\bar{3}m$ (D_{2d}^{16}), которой описывается структура $\text{Re}_2\text{BaCuO}_5$, магнитные атомы занимают одну и ту же четырехкратную позицию $4c$ со следующими координатами: (1) $x, 1/4, z$; (2) $1/2-x, 3/4, z+1/2$; (3) $-x, 3/4, -z$; (4) $x+1/2, 1/4, 1/2-z$. Группе волнового вектора $k = [0, 0, 0]$ соответствуют 8 одномерных неприводимых представлений Γ_i [13, 14]. Их базисными функциями являются $\Gamma_1 (G_y)$, $\Gamma_2 (A_x C_z)$, $\Gamma_3 (F_x G_z)$, $\Gamma_4 (C_y)$, $\Gamma_5 (F_y)$,

$\Gamma_6(C_x F_z)$, $\Gamma_7(G_x F_z)$ и $\Gamma_8(A_y)$, причем представления Γ_2 , Γ_3 , Γ_6 , Γ_7 дважды вырождены. Здесь

$$\begin{aligned} F &= S_1 + S_2 + S_3 + S_4, \\ C &= S_1 + S_2 - S_3 - S_4, \\ G &= S_1 - S_2 + S_3 - S_4, \\ A &= S_1 - S_2 - S_3 + S_4. \end{aligned}$$

Группа вектора $k = [0, 1/2, 0]$ представлена двумя трижды вырожденными двумерными представлениями. В каждом представлении одна базисная функция связывает пару спинов 1 и 4 атомов, а другая функция — пару 2 и 3. В одном представлении x - и y -проекции спинов в паре направлены одинаково, а z -проекции направлены противоположно. В другом — ситуация обратная — x - и y -проекции спинов в паре направлены противоположно, а z -проекции направлены одинаково.

4. Магнитная структура $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$

На первом этапе определения магнитной структуры мы рассчитывали структурные факторы небольшого числа рефлексов на основе тех моделей, которые описываются базисными функциями, принадлежащими к одному представлению. Их анализ во многих случаях позволяет резко сократить число возможных вариантов. Затем точное направление моментов определялось путем подгонки расчетного профиля к измеренному в процессе варьирования.

Для $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$ анализ различных вариантов приводит к представлению, в котором x - и y -проекции спинов в паре направлены одинаково, а z -проекции противоположно. В процессе уточнения накладывались очевидные условия, что величины моментов для атомов в одной позиции должны быть одинаковы. Оказалось, что нейтронограммы магнитного рассеяния могут быть описаны моделью с чередованием знаков проекций спинов $F_x F_y G_z$. В этой модели моменты атомов, связанных инверсией, направлены одинаково. Полученные величины спиновых проекций сведены в табл. 3. В процессе уточнения проекции, величина которых не превосходила двух стандартных ошибок, полагались равными 0. О степени сходимости можно судить по R -фактору, рассчитанному по интенсивностям магнитных рефлексов, а также по разности между измеренной и рассчитанной нейтронограммами (рис. 2, б). Магнитная структура $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$ для одной ячейки показана на рис. 4. При трансляции вдоль оси b направление всех спинов меняется на противоположное.

Таблица 3

Величины проекций магнитных моментов и полный момент для $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$ в магнетонах Бора

		m_x	m_y	m_z	\bar{m}
8K	Cu	-1.10(7)	-0.0	-0.0	1.10(7)
	Er1	4.90(8)	-1.2(3)	-1.9(2)	5.4(1)
	Er2	1.07(9)	-0.0	-3.6(2)	3.7(2)
	$R = 0.09$				
1.3K	Cu	-1.3(1)	-0.0	-0.0	1.3(1)
	Er1	7.86(6)	-1.1(3)	-3.3(2)	8.5(1)
	Er2	1.60(8)	-0.0	-6.9(1)	7.1(1)
	$R_m = 0.073$				

Таблица 4

Величины проекций магнитных моментов и полный момент для Dy_2BaCuO_5 в магнетонах Бора при температуре 12 и 2 К

		m_x	m_y	m_z	m
$k = [0.1/2.0]$ 12К	Cu	-0.6(1)	0.0	0.0	0.6(1)
	Dy1	1.96(7)	0.0	0.0	1.96(7)
	Dy2	0.8(1)	1.8(1)	0.0	1.96(7)
$k = [0.0.0]$ 2К	Cu	0.0	0.0	0.78(8)	0.78(8)
	Dy1	0.6(1)	0.0	9.10(7)	9.11(8)
	Dy2	8.45(8)	0.0	1.67(7)	8.6(1)
$R_m = 0.093$					

5. Магнитная структура Dy_2BaCuO_5

Для Dy_2BaCuO_5 интенсивность слабых магнитных рефлексов, наблюдаемых при температуре 12 К можно удовлетворительно описать той же модой $F_x F_y G_z$, что и в случае Er_2BaCuO_5 , но с другой ориентацией магнитных моментов относительно кристаллографических осей. Однако приписать наблюдаемую интенсивность только упорядочению спинов меди не удастся. В отличие от случая Er_2BaCuO_5 из-за малой статистики и небольшого числа наблюдаемых рефлексов одновременное варьирование моментов меди и редкой земли невозможно, и подгонка величин проекций моментов проводилась поочередно. Кроме того, в процессе варьирования полные моменты в двух кристаллографических позициях считались одинаковыми. Конечный результат приведен в табл. 4.

Ниже 10 К магнитная структура существенно иная. Из возможных 8 мод, отвечающих разным неприводимым представлениям для $k = [0, 0, 0]$, наблюдаемые интенсивности магнитных рефлексов можно описать только модой $\Gamma_6 (G_x A_z)$. В отличие от уже рассмотренных магнитных структур в этом типе упорядочения спины атомов, связанные инверсией, направлены противоположно, а моменты меди направлены по оси с. Магнитные структуры

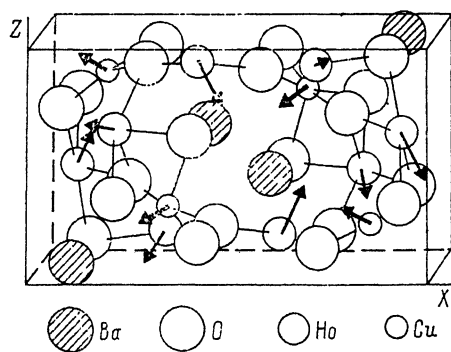
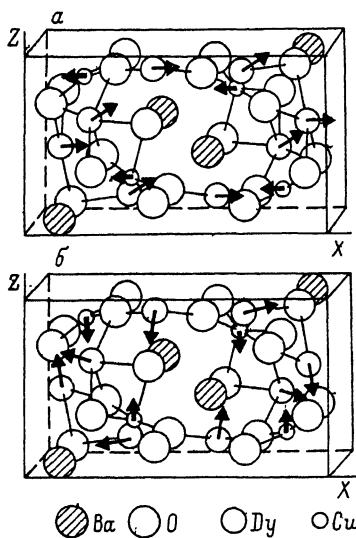


Рис. 5. Магнитные структуры Dy_2BaCuO_5 для одной элементарной ячейки. Стрелками показано направление магнитных моментов.

a — магнитная структура при температуре 12 К, $k = (0.1/2.0)$; b — магнитная структура при температуре 2 К, $k = (0.0.0)$.

Рис. 6. Магнитная структура Nd_2BaCuO_5 для одной элементарной ячейки при температуре 2 К. Стрелками показано направление магнитных моментов.

Du_2BaCuO_5 при 12 и 2 К показаны на рис. 5, а соответствующие величины проекций моментов приведены в табл. 4.

6. Магнитная структура Ho_2BaCuO_5

Для Ho_2BaCuO_5 магнитная нейтронограмма при температуре 10 К (рис. 3, а) похожа на нейтронограмму Er_2BaCuO_5 (рис. 1, а). Поскольку из-за малой статистики определить направление спинов меди независимо не представлялось возможным, мы полагали, что их упорядочение такое же, как в Er_2BaCuO_5 и Du_2BaCuO_5 . Если, кроме того, принять условие, что наблюдаемые интенсивности магнитных рефлексов можно удовлетворительно описать, если принять чередование знаков $F_x F_y G_x$. К сожалению, малая интенсивность магнитных рефлексов не позволяет сделать однозначного заключения о направлении спинов по отношению к кристаллографическим осям. Вариант, наилучшим образом описывающий нейтронограмму, приведен в табл. 5.

Таблица 5

Величины проекций магнитных моментов и полный момент для Ho_2BaCuO_5 в магнетонах Бора при 10 К

	m_x	m_y	m_z	m
Cu	-0.6(1)	0.0	0.0	0.6(1)
Ho1	0.0	1.46(8)	-1.51(8)	2.11(4)
Ho2	2.11(4)	0.0	0.0	2.11(4)
$R_m = 0.22$				

Как уже упоминалось, нейтронограмма магнитного рассеяния для Ho_2BaCuO_5 при 1.3 К содержит две системы рефлексов. Поскольку рефлекс сильно перекрываются, прямая подгонка профиля, обусловленного двумя неизвестными структурами, практически невозможна. Чтобы разделить рефлекс с разными волновыми векторами, мы использовали так называемый метод разложения Паули [15], в котором экспериментальный спектр аппроксимируется суммой пиков, положение которых определяется параметрами элементарной ячейки. Этот метод реализован в программе [16], где одновременно варьируются интенсивности всех рефлексов (до 300), параметры ячейки и параметры, определяющие форму одиночного пика. В рассматриваемом случае дело осложнялось еще тем обстоятельством, что конечный результат из-за сильного перекрытия очень чувствителен к параметрам ячейки. Поэтому мы фиксировали параметры ячейки, которые получили профильным анализом участка исходной нейтронограммы на больших углах дифракции, где магнитное рассеяние практически отсутствует. На рис. 3, б и в показано разложение исходного профиля (пунктир) на составляющие с разными системами рефлексов.

Составляющая магнитного рассеяния с $k = [0, 1/2, 0]$ (рис. 3, в) очень похожа на нейтронограмму, которая наблюдалась для Du_2BaCuO_5 при температуре 12 К (рис. 2, а), поэтому естественно предположить, что и спиновое упорядочение тоже должно быть похожим. Для описания этого профиля мы ограничились только теми моделями, в которых спины, связанные инверсией, направлены одинаково. Кроме того, полагалось, что абсолютные величины проекций спинов в одной позиции равны. Анализ структурных факторов таких моделей приводит к тому, что обязательно должна присутствовать у-компонента спина у атома Ho. Но в случае однофазной системы очевидно, что одна и та же проекция спина может меняться при трансляции только с каким-то одним вектором распространения. Другими словами, магнитные структуры должны реализовываться на разных, ортогональных проекциях спина. Отсюда с необходимостью

следует, что составляющая с $k = [0, 0, 0]$ должна описываться только теми модами, в которых z -компонента спина отсутствует. Действительно, попытка описать эту составляющую модами $\Gamma_1(G_y)$, $\Gamma_4(C_y)$, $\Gamma_5(F_y)$, $\Gamma_8(A_y)$ не приводит к успеху. Перебор четырех оставшихся мод однозначно приводит к той же моде $\Gamma_6(C_xA_z)$, что мы наблюдали для Dy_2BaCuO_5 при температуре 2 К, однако с другим направлением спинов.

Вернемся к составляющей с $k = [0, 1/2, 0]$. Поскольку составляющая с $k = [0, 0, 0]$ описывается модой C_xA_z с отличными от нуля z -проекциями спинов Но, то в магнитной структуре с $k = [0, 1/2, 0]$ z -проекции должны отсутствовать. При этом условии из вышеупомянутых моделей только для двух мод F_xF_y и A_xA_y рассчитанные интенсивности соответствуют наблюдаемым. Однако только мода F_xF_y удовлетворяет условию ортогональности, т. е. реализуется на компонентах, которые отсутствуют в структуре с $k = [0, 0, 0]$.

Заметим, что полный момент складывается из двух ортогональных компонент, соответствующих двум волновым векторам. Одна компонента меняет знак при трансляции по оси b , а другая нет. В отличие от магнитной структуры Dy , когда величины моментов в двух кристаллографических позициях мало отличались (табл. 4), в случае Ho_2BaCuO_5 различие довольно велико. Более того, оказалось, что отношение величин моментов как для структуры с $k = [0, 0, 0]$, так и для структуры с $k = [0, 1/2, 0]$ примерно одинаково. Это может служить дополнительным независимым аргументом в пользу предлагаемой модели. При дальнейшей обработке мы полагали, что рассматриваемое отношение для мод с $k = [0, 0, 0]$ и $k = [0, 1/2, 0]$ одинаково.

Окончательное уточнение проекций моментов и упомянутого отношения проводилось на совокупном массиве всех рефлексов. Причем, поскольку магнитные рефлексы с $k = [0, 0, 0]$ совпадают с ядерными, более точный результат получается, если работать с исходной нейтронограммой, а не разностной, т. е. рассчитывать одновременно ядерное и магнитное рассеяние.

Упорядочение меди должно описываться тем же неприводимым представлением, что и упорядочение редкой земли. Одновременное варьирование всех компонент спинов меди, приводит к тому, что есть x - и небольшая z -проекция, упорядоченные с $k = [0, 1/2, 0]$. Как уже упоминалось, z -е компоненты спинов Но с $k = [0, 1/2, 0]$ должны отсутствовать. Но при этом структурный фактор по положениям редкой земли для рефлекса 1, 1/2, 0 равен 0. Поэтому слабый рефлекс с такими индексами (на угле 9.1 градуса) (рис. 3, в) с необходимостью следует отнести к упорядочению меди. Но структурный фактор по позициям меди для этого рефлекса отличен от 0 только в случае, если есть z -проекция спинов.

Окончательные результаты приведены в табл. 6, магнитная структура приведена на рис. 6. Следует отметить, что наблюдаемую нейтронограмму можно также описать двухфазной системой, в которой каждая фаза имеет магнитную структуру с одним из векторов распространения. Хотя из нейтронографического эксперимента нельзя сделать однозначного вывода в пользу того или иного варианта, у нас нет достаточных оснований рассматривать вариант двух фаз.

Таблица 6

Величины проекций магнитных моментов и полные моменты для Ho_2BaCuO_5 в магнетонах Бора при 1.3 К

	Проекция $k = [0.1/2.0]$			Проекция для $k = [0.0.0]$			
	m_x	m_y	m	m_x	m_y	m_z	m
Cu	0.86(9)	0.0	-0.6(2)				1.1(1)
Ho1	5.08(8)	0.0	0.0	0.0	0.0	-9.1(1)	10.4(1)
Ho2	0.0	1.99(3)	0.0	2.15(8)	0.0	1.99(3)	4.08(4)
$R_m = 0.085$							

При всем многообразии наблюдаемых магнитных структур, которое обусловлено анизотропным взаимодействием спинов редкой земли, можно отметить общие особенности. Для $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$ магнитный порядок возникает, по-видимому, одновременно в медной и редкоземельной подсистемах. Во всяком случае, мы не заметили изменения магнитной структуры при переходе, соответствующем максимуму восприимчивости и теплоемкости при 5 К. Можно отметить лишь разную температурную зависимость моментов в двух позициях Er, что, кстати, очень похоже на ситуацию в $\text{Er}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ [17]. В случае $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$ и $\text{Ho}_2\text{BaCuO}_5$ с понижением температуры сначала происходит магнитное упорядочение медной подсистемы, что обуславливает первый высокотемпературный максимум восприимчивости. Спины меди, как и в случае $\text{Er}_2\text{BaCuO}_5$, коллинеарны и направлены по оси а. В двух соседних по оси b ячейках направление спинов противоположно. Несмотря на слабую связь медной и редкоземельной подсистем, возникновение магнитного порядка спинов меди приводит к частичной поляризации спинов редкой земли. При дальнейшем понижении температуры обменное взаимодействие приводит к упорядочению редкоземельной подсистемы, что в свою очередь вызывает переориентацию спинов меди. Такая трактовка согласуется с тем, что упорядочение и переориентация проходят переходом первого рода с образованием в некотором температурном интервале многофазной системы, как наблюдалось в [18] для $\text{Dy}_2\text{BaCuO}_5$.

Выражаем благодарность П. Карнаевой за помощь в подготовке этой публикации.

Список литературы

- [1] Hazen R. M., Finger L. W., Angel R. J., Prewitt C. T., Ross N. L., Mao H. K., Hadidiacos C. G., Hor P. H., Meng R. L., Chu C. W. // *Phys. Rev. B*. 1987. V. 35. N 13. P. 7238—7241.
- [2] Wong-Ng W., Kuchinski M. A., McMurdie H. F., Paretzkin B. // *Powder Diffraction*. 1989. V. 4. N 1. P. 2—8.
- [3] Watkins S. F., Fronczek F. R., Wheelock K. S., Goodrich R. G., Hamilton W. O., Jonson W. W. // *Acta Cryst.* 1988. V. C44. P. 3—6.
- [4] Campa J. A., Gomez de Salazar J. M., Gutierrez-Puebla E., Monge M. A., Rasines I., Ruiz-Valero C. // *Phys. Rev. B*. 1988. V. 37. N 1. P. 529—532.
- [5] Черненко Ю. П., Плахтий В. П., Ковалев А. В. // *Препринт ЛИЯФ*. 1983. № 897.
- [6] Salinas-Sanchez A., Saez-Puche R., Alario-Franco M. A. // *J. Sol. State Chem*. 1990. V. 89. P. 361—365.
- [7] Levitin R. Z., Mill B. V., Moshalkov V. V., Samarin N. A., Snegirev V. V., Zoubkova J. // *J. Magn. Mat.* 1990. V. 90. N 91. P. 536—540.
- [8] Chattopadhyay T., Brown P. J., Kobler U., Wilhelm M. // *Europhys. Lett.* 1989. V. 8(7). P. 685—689.
- [9] Голосовский И. В., Харченко В. П., Булкин А. П., Касман Я. А., Петрова В. И., Плахтий В. П., Приемышев В. А., Трунов В. А., Тюкавин В. А., Федорова Э. И. // *Препринт ЛИЯФ*. 1988. № 374.
- [10] Hewat A. W. // *Institut Laue-Langevin. Report* 74N62S. 1974.
- [11] Lander G. H., Brun T. O. // *J. Chem. Phys.* 1970. V. 53. P. 1387—1395.
- [12] Freeman A. J., Desclaux J. P. // *J. Magn. Magn. Mat.* 1979. V. 12. P. 11—20.
- [13] Ковалев О. В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. М.: Наука, 1986.
- [14] Изюмов Ю. А., Найш В. Е., Озеров Р. П. Нейтроны и твердое тело. Т. 2. Нейтронография магнетиков. М.: Атомиздат, 1981.
- [15] Pawley G. S. // *J. Appl. Cryst.* 1981. V. 14. P. 357—361.
- [16] Rodrigues J., Anne M., Pannetier J. // *Institut Laue-Langevin. Report* 87R014T. 1987.
- [17] Попова М. Н., Челурко Г. Г. // *Письма в ЖЭТФ*. 1990. Т. 52. № 10. С. 1157—1161.