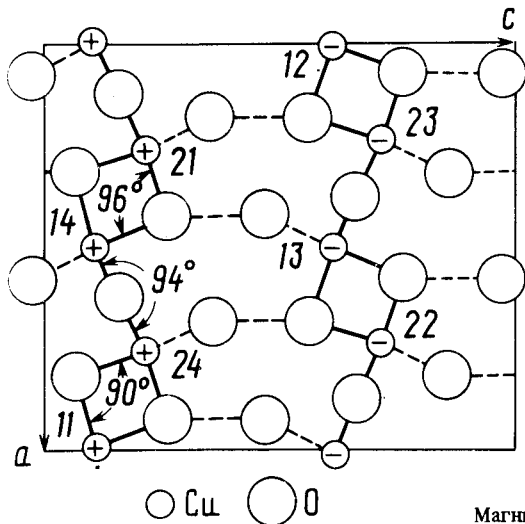


МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА $\text{Lu}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$

В.П.Плахтий, И.В.Голосовский, Я.Зоубкова,
С.А.Кузнецов, Б.В.Миль, В.П.Харченко

Определенная по данным нейтронной дифракции магнитная структура $\text{Lu}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ представляет собой чередующиеся по знаку ферромагнитные слои, параллельные плоскости ab . Магнитный момент на атом меди составляет $0,72(3)\mu_B$.

В последнее время проявляется интерес к купратам сверхпроводящих систем $\text{R}_2\text{O}_3\text{--BaO--CuO}_x$. В частности, в работах ¹⁻⁶ сообщается о магнитных свойствах соединений $\text{R}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ с $\text{R} = \text{Gd, Tb, Lu, Y, Sc, In}$. Мы приводим здесь магнитную структуру $\text{Lu}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$, определенную по данным нейтронной дифракции.



Магнитное упорядочение и обменные связи в $\text{Lu}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$

Однофазный поликристаллический образец $\text{Lu}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ был синтезирован по керамической технологии из оксидов при температуре $1030 - 1050^\circ\text{C}$ на воздухе. Нейтронографические исследования проводились на 48-счетчиковом дифрактометре ⁷ при длине волны $\lambda = 1,383 \text{ \AA}$. Нейтронограмма, измеренная в парамагнитной фазе ($T = 30 \text{ K}$), использовалась для уточнения кристаллической структуры ⁸ по методу Ритвелда в рамках пространственной группы $C_{2v}^9 (Pna2_1)$. (Отметим, что в ⁸ была принята нестандартная установка $P2_1nb$). Кроме параметров элементарной ячейки $a = 10,701(1)$; $b = 3,4111(4)$; $c = 12,363(1)$ уточнялись координаты атомов кислорода, отличие которых от значений ⁸ оказалось несущественным (до 5 стандартных отклонений).

В магнитоупорядоченной фазе на нейтронограмме появляются очень слабые магнитные отражения, индицируемые как 001, 201 и 003, т. е. волновой вектор магнитной структуры $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Базисными функциями неприводимых представлений группы этого волнового вектора являются: $\Gamma_1(G_i, A_i, C_i)$; $\Gamma_2(A_i, G_i, F_i)$; $\Gamma_3(F_i, C_i, A_i)$; $\Gamma_4(C_i, F_i, G_i)$, где

$$F_i = \frac{1}{2} (S_{i1} + S_{i2} + S_{i3} + S_{i4}),$$

$$C_i = \frac{1}{2} (S_{i1} + S_{i2} - S_{i3} - S_{i4}),$$

$$G_i = \frac{1}{2} (S_{i1} - S_{i2} + S_{i3} - S_{i4}),$$

$$A_i = \frac{1}{2} (S_{i1} - S_{i2} - S_{i3} + S_{i4}),$$

а $i = 1, 2$ для двух неэквивалентных подсистем атомов меди, показанных на рисунке. Наличие отражения 001 и отсутствие 100 однозначно свидетельствует о том, что упорядочение спинов в обеих подсистемах описывается модой **A**. Соотношение же интенсивностей отражений 001 и 003 дает взаимную ориентацию $S_{11} = S_{21}$. (Мы полагаем, что $|S_{11}| = |S_{21}|$). Отношение интенсивностей 001 и 201 указывает на то, что спины направлены по оси **b**. Таким образом, упорядочение спинов описывается модой $A_1^y + A_2^y = \frac{1}{2} (S_{11}^y - S_{12}^y - S_{13}^y + S_{14}^y + S_{21}^y - S_{22}^y - S_{23}^y + S_{24}^y)$. Величина магнитного момента на атом меди, полученная из сравнения экспериментальных и расчетных значений интенсивностей магнитных отражений (таблица), составляет $0,72(3)\mu_B$.

(hkl)	001	201	003
I_{obs}	331 (14)	52 (15)	57 (15)
I_{calc}	336	25	10

Магнитная структура $\text{Lu}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ может быть изображена чередующимися по знаку ферромагнитными слоями, параллельными плоскости **ab**. Анизотропные взаимодействия должны приводить к слабым компонентам G_i^x, C_i^z , относящимся к тому же неприводимому представлению Γ_1 , что и A_i^y .

Ионы Cu^{2+} находятся в сильно искаженных тригональных бипирамидах из атомов кислорода. Волновой функцией основного состояния является $d_{\xi^2 - \eta^2}$, где ξ и η — локальные оси, направленные к ближайшим атомам кислорода. При этом в цепочках $\text{Cu}-\text{O}-\text{Cu}$ с углами связей (сплошные линии на рисунке), близкими к $\pi/2$, кинетический обмен подавлен, и взаимодействия должны быть положительными. Связи между цепочками осуществляются парами последовательно расположенных атомов кислорода (пунктирными линиями), и можно ожидать, что они намного слабее связей внутри цепочки. Из магнитной струк-

туры следует, что взаимодействие между соседними цепочками положительно в направлении **b** и отрицательно в направлении **a**. Подавление магнитным полем слабого отрицательного взаимодействия при наличии достаточно сильной анизотропии ⁹ и приводит к метамгнитному переходу, наблюдавшемуся в ⁶.

Литература

1. Troč R. et al. Phys. Lett. A, 1987, **125**, 222.
2. Famery R., Queyroux F. Mat. Res. Bull., 1989, **24**, 275.
3. Troč R. et al. Physica B, 1989, **154**, 189.
4. Ramakrishna R.L. et al. Sol. St. Comm., 1988, **68**, 775.
5. Cheong S.W. et al. Phys. Rev. B, 1988, **38**, 7013.
6. Зоубкова Я. и др. Письма в ЖЭТФ, 1989, **49**, 524.
7. Голосовский И.В. и др. Препринт ЛИЯФ, № 1374, 1988.
8. Freund H.-R., Müller-Buschbaum H. Z. Naturforsch. B, 1977, **32**, 1123.
9. Groenendijk H.A. et al. Physica B, 1981, **108**, 47.

Институт ядерной физики им. Б.П.Константинова
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
21 ноября 1989 г.