

Resumen:

En esta Tesis se describe la estructura y comportamiento magnético de los materiales cerámicos REBaCuCoO_{5+δ} (RE = Y, La, Pr, Nd, Sm, Eu, Dy, Er y Tm) obtenidas por difracción de rayos X y neutrones de polvo policristalino y medidas de susceptibilidad magnética. Se refinaron las estructuras nuclear y magnética por el método de Rietveld combinando diagramas de difracción de neutrones y rayos X obteniéndose, en algunos casos, parámetros estructurales de alta precisión. Los compuestos con RE = Y, Dy, Er y Tm resultaron isoestructurales y fueron refinados en una estructura tetragonal P4/mmm típica de perovskitas 112 donde el Cu y el Co ocupan sitios distintos en la celda, observándose distancias Cu-O y Co-O consistentes con una pirámide CuO₅ elongada en z y una pirámide CoO₅ más simétrica. Los momentos magnéticos de los átomos de Cu(II) y Co(III) en estado IS se ordenan antiferromagnéticamente por debajo de la temperatura de Néel, que se estima está entre 500 y 600 K. El ordenamiento puede describirse mediante un grupo espacial bicolor I4'/m'm'm con $\mathbf{a}_M = \sqrt{2} \mathbf{a}$ y $\mathbf{c}_M = 2\mathbf{c}$. Los momentos magnéticos orientados según \mathbf{c} , se ordenan antiferromagnéticamente en el plano xy adquiriendo un ordenamiento +|-+ en z donde el acoplamiento a través del oxígeno apical de las pirámides es antiferromagnético. Los compuestos con RE = Sm y Eu, presentan una estructura tetragonal idéntica a los anteriores, excepto por la inclusión de cantidades apreciables de oxígeno no estequiométrico que aumenta al pasar de Dy a Eu y de Eu a Sm como lo hace el radio iónico de RE. Los compuestos con RE = Pr y Nd se describen mediante una estructura P4/mmm. La aparición de defectos de apilamiento en ambos compuestos produce formas de pico inusuales que son imposibles de ajustar con los algoritmos disponibles en la actualidad. El alto contenido de oxígeno no estequiométrico encontrado ($\delta \approx 0.5$), produce cambios en el estado de oxidación de Cu(II) que pasa a Cu(III) lo que se asocian a una estructura magnética distinta, que puede describirse en base al grupo bicolor I4'm'm con $\mathbf{a}_M = \sqrt{2} \mathbf{a}$ y $\mathbf{c}_M = \mathbf{c}$. El compuesto LaBaCuCoO_{5+δ} presenta una estructura diferente, dominada por un arreglo pseudo-cúbico de átomos que fue descrita por el grupo espacial ortorrómbico Pmmm, con una celda $1 \times 1 \times 3a_P$ siendo a_P el parámetro de celda de la perovskita cúbica y $\delta \approx 0.5$. El comportamiento magnético de este compuesto es aparentemente similar al de los que contienen Pr y Nd, pudiendo observarse una aparente relación entre la temperatura de transición y el cambio de tierra rara, reduciéndose T_N al aumentar el radio iónico de RE.