

<b>Capítulo Primero: Introducción</b>	1
1.1 Respecto a esta Tesis	3
1.2 Estructura de compuestos tipo perovskita 112	6
1.3 Comportamiento estructural y magnético de cationes $RE^{3+}$	12
1.4 Comportamiento estructural y magnético de cationes Cu(I), Cu(II) y Cu(III)	14
1.5 Comportamiento estructural y magnético de cationes Co(III) y Co(IV)	15
1.6 Caracterización estructural y magnética de compuestos $REBaCuCoO_{5+\delta}$ de tipo perovskita 112 (RE = tierra rara o ytrio):	16
Referencias del capítulo primero	18
<b>Capítulo Segundo: Marco teórico.</b>	21
2.1 Introducción.	23
2.2 El estado cristalino.	23
2.2.1 Periodicidad y celda unidad.	23
2.2.2 Simetría de la red periódica.	24
2.3 Propiedades magnéticas de la materia.	26
2.3.1 Teoría macroscópica del magnetismo.	27
2.3.2 Teoría microscópica del magnetismo.	28
2.3.2.1 Diamagnetismo (DM).	30
2.3.2.2 Paramagnetismo (PM).	31
2.3.2.3 Ferromagnetismo (FM).	33
2.3.2.4 Antiferromagnetismo (AFM).	35
2.3.2.5 Ferrimagnetismo (FIM) y estructuras magnéticas complejas.	37
2.3.2.6 Spin-glass (SG).	37
2.3.3 Modelos teóricos de magnetismo en cerámicos.	39
2.3.3.1 Sistemas magnéticamente diluidos.	39
2.3.3.2 Sistemas magnéticamente concentrados.	39
2.3.3.3 Modelo del Campo Medio.	40
2.3.3.4 Modelos de Heisenberg.	41
2.4 Simetría de las propiedades físicas.	42
2.4.1 Simetría bicolor y operaciones de antisimetría.	42
2.4.2 Momentos magnéticos y simetría de Shubnikov.	45

2.5 Medidas magnéticas en materiales.	47
2.6 El método de Polvo.	49
2.6.1 Polvo policristalino.	49
2.6.2 Condiciones de difracción: posición de los máximos.	50
2.6.3 Intensidad de los máximos de difracción.	53
2.6.3.1 Interacción entre los rayos X y la red cristalina.	53
2.6.3.2 Interacción entre los neutrones y la red cristalina.	59
2.6.3.3 Dispersión de neutrones por los núcleos.	59
2.6.3.4 Dispersión de neutrones por el momento magnético del átomo.	62
2.6.4 Forma de los máximos de difracción.	65
2.6.4.1 Ensanchamiento debido a la muestra ( <i>f</i> ).	66
2.6.4.2 Ensanchamiento debido a factores instrumentales ( <i>g</i> ).	69
2.6.4.3. Asimetría en los picos de difracción.	70
2.6.5. Geometría del experimento de difracción.	72
2.6.5.1 Geometría de reflexión para-focalizante (Bragg-Brentano).	75
2.6.5.2. Geometría de reflexión con haz paralelo.	76
2.6.5.3 Geometría de transmisión con haz incidente paralelo.	77
2.6.6 Estrategias de colección de datos.	77
2.6.6.1 Métodos de colección continua.	78
2.6.6.2 Métodos de colección paso a paso.	79
2.6.6.3 Selección del tiempo de conteo en estrategias de colección paso a paso.	83
2.7 Análisis estructural a partir de datos de difracción de polvo – El método de Rietveld.	85
2.7.1 Historia y estado actual.	85
2.7.2 El modelo.	88
2.7.3 Criterios de Ajuste.	91
2.7.4 Parámetros a ajustar.	95
2.7.4.1 Parámetros globales del diagrama.	95
2.7.4.2 Parámetros de pico.	100
2.7.4.3 Modelo estructural:	102
2.7.5 Criterios de convergencia:	104

2.7.6 Alcances del método de Rietveld:	104
Referencias del capítulo segundo.	106
<hr/>	
<b>Capítulo Tercero: Actividades y Métodos Experimentales.</b>	<b>109</b>
3.1 Introducción.	111
3.2 Síntesis.	111
3.2.1 Técnicas de preparación de muestras.	111
3.2.1.1 Reacción al estado sólido.	111
3.2.1.2 Método de Sol-gel.	112
3.2.1.3: Comparación entre los métodos	112
3.2.2 Materiales, reactivos y equipos utilizados para síntesis de muestras.	114
3.2.2.1 Materiales.	114
3.2.2.2 Reactivos.	114
3.2.2.3 Equipos utilizados (localización o procedencia).	114
3.2.3 Muestras Preparadas.	116
3.2.3.1 YBaCuCoO <sub>5</sub> .	116
3.2.3.2 LaBaCuCoO <sub>5</sub> .	117
3.2.3.3 CeBaCuCoO <sub>5</sub> :	117
3.2.3.4 PrBaCuCoO <sub>5</sub> :	117
3.2.3.5 NdBaCuCoO <sub>5</sub> :	117
3.2.3.6 SmBaCuCoO <sub>5</sub> :	118
3.2.3.7 EuBaCuCoO <sub>5</sub> :	118
3.2.3.8 DyBaCuCoO <sub>5</sub> :	118
3.2.3.9 ErBaCuCoO <sub>5</sub> :	118
3.2.3.10 TmBaCuCoO <sub>5</sub> :	118
3.2.3.11 LuBaCuCoO <sub>5</sub> :	118
3.2.3.12 Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> patrón:	118
3.3 Experimentos de difracción realizados.	119
3.3.1 Difracción de rayos X convencional (CXPB).	119
3.3.2 Difracción de rayos X de sincrotrón (SXPB).	122
3.3.2.1 Primera Etapa.	124
3.3.2.2 Segunda Etapa.	126
3.3.2.3 Tercera Etapa.	129

3.3.3 Difracción de neutrones (NPD).	132
3.3.4 Difracción magnética de neutrones (MNPd).	139
3.4 Técnicas complementarias de análisis estructural.	141
3.4.1 Microscopía electrónica de barrido (SEM).	141
3.4.2 Espectroscopía de dispersión de rayos X (EDS).	144
3.4.3 Análisis termogravimétrico (TGA).	145
3.5 Técnicas caracterización física.	147
3.5.1 Medidas magnéticas.	147
3.5.2 Medidas eléctricas.	150
Referencias del capítulo tercero	152

### **Capítulo Cuarto: Estructura y magnetismo de REBaCuCoO<sub>5</sub>**

<b>(RE=Y, Dy, Er y Tm).</b>	153
4.1 Introducción.	155
4.2 YBaCuCoO <sub>5</sub> .	155
4.2.1 Modelos estructurales.	155
4.2.2 Caracterización estructural de YBaCuCoO <sub>5</sub> a temperatura ambiente.	158
4.2.3 Caracterización estructural y magnética de YBaCuCoO <sub>5</sub> a 30 K.	170
4.3 ErBaCuCoO <sub>5</sub> .	180
4.3.1 Caracterización estructural de ErBaCuCoO <sub>5</sub> a temperatura ambiente.	180
4.3.2 Caracterización magnética de ErBaCuCoO <sub>5</sub> entre 31 y 600 K.	186
4.4 TmBaCuCoO <sub>5</sub> .	190
4.4.1 Caracterización estructural y magnética de TmBaCuCoO <sub>5</sub> a temperatura ambiente.	191
4.4.2 Caracterización magnética de TmBaCuCoO <sub>5</sub> entre 4 y 40 K.	197
4.5 DyBaCuCoO <sub>5</sub> .	201
4.5.1 Caracterización estructural y magnética de DyBaCuCoO <sub>5</sub> a temperatura ambiente.	202
4.6 Discusión de resultados.	206

4.6.1 Análisis estructural.	206
4.6.1 Análisis Magnético.	212
Referencias del capítulo cuarto	217

### **Capítulo Quinto: Defectos microestructurales en REBaCuCoO<sub>5+δ</sub>**

<b>(RE = Pr, Nd, Sm y Eu).</b>	219
5.1 Introducción.	221
5.2 Caracterización de PrBaCuCoO <sub>5+δ</sub> y NdBaCuCoO <sub>5+δ</sub> .	221
5.2.1 Análisis estructural preliminar.	222
5.2.2 Estudio estructural de PrBaCuCoO <sub>5+δ</sub> a temperatura ambiente.	225
5.2.3: Estudio estructural de NdBaCuCoO <sub>5+δ</sub> a temperatura ambiente.	235
5.2.4 Estudio estructural y magnético de PrBaCuCoO <sub>5+δ</sub> y NdBaCuCoO <sub>5+δ</sub> a baja temperatura.	239
5.3 Estudio estructural de SmBaCuCoO <sub>5+δ</sub> y EuBaCuCoO <sub>5+δ</sub> a temperatura ambiente.	245
5.4 Discusión y comparación de resultados.	252
Referencias del capítulo quinto	256

### **Capítulo Sexto: Estudio estructural y magnético de LaBaCuCoO<sub>5+δ</sub>.**

6.1 Introducción.	259
6.2 Modelos estructurales.	259
6.3 Caracterización estructural de LaBaCuCoO <sub>5+δ</sub> por difracción de rayos X y SEM a temperatura ambiente.	261
6.4 Caracterización estructural de LaBaCuCoO <sub>5+δ</sub> por NPD y SXPd a temperatura ambiente.	265
6.5 Caracterización magnética de LaBaCuCoO <sub>5+δ</sub> entre 7.5 y 300 K.	284
6.6 Estudios de conductividad de LaBaCuCoO <sub>5+δ</sub> a bajas temperaturas.	294
6.6 Conclusiones.	295
Referencias del capítulo sexto	297

### **Capítulo Séptimo: Conclusiones generales y perspectivas.**

7.1 Conclusiones generales.	301
7.1.1 Estructura de compuestos REBaCuCoO <sub>5+δ</sub> .	301

7.1.2 Propiedades magnéticas de REBaCuCoO <sub>5+δ</sub> .	311
7.1.3 Comentarios sobre el artículo “Magnetic interactions in Cu-based layered transition metal oxides”.	317
7.1.4 Sobre la validez del método de Rietveld aplicado a los estudios realizados	319
7.2 Perspectivas.	321
7.2.1 Actividades en curso y estudios a corto plazo.	322
7.2.2 Actividades planificadas a mediano plazo.	323
7.2.3 Actividades planificadas a largo plazo.	323
Referencias del capítulo séptimo	325