

ВОЗМОЖНОСТЬ ТОРОИДАЛЬНОГО АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ПОРЯДКА В СОЕДИНЕНИЯХ СО СТРУКТУРОЙ RCO_5

Ю.М. Гуфан^{1,2}, А.А. Новакович¹, З.Б. Чачхиани³, А.В. Скиданенко¹

¹Отдел теоретической физики НИИ физики
ФГАОУ ВО «Южный Федеральный университет», г. Ростов-на-Дону;
²ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский госуниверситет», г. Нальчик;
³Грузинский технический университет Тбилиси, Грузия
E-mail: yu.gufan@gmail.com

AN OPPORTUNITY OF TOROIDAL ANTIFERROMAGNETIC ORDER IN COMPOUNDS WITH RCO_5 STRUCTURE

Yu.M. Gufan^{1,2}, A.A. Novakovich¹, Z.B. Chachkhiani³, A.V. Skidanenko¹

¹Department of Theoretical Physics of Scientific Research Institute of Physics,
Federal State Self-funded Educational Institution of Higher Education
“Southern Federal University”, Rostov-on-Don;
²Federal State Budget-funded Educational Institution of Higher Education “Kabardino - Balkarian
State University”, Nalchik;
³Georgian Technical University, Tbilisi, Georgia
E-mail: yu.gufan@gmail.com

Проведено исследование двойных интерметаллидов со структурой RCO_5 . Интерметаллиды со структурой RCO_5 продолжают играть существенную роль и как магнитомягкие (RCO_5), и как магнитожесткие (RMn_5) материалы в изделиях микроэлектроники, как более стабильные. Здесь R- редкоземельный элемент, а Me – 3d металл.

The investigation of binary intermetallic compounds with RCO_5 structure has been carried out. The intermetallic compounds with the structure RCO_5 continue to play a significant role both as retentive materials (RCO_5) and as low-coercitivity materials (RMn_5) in microelectronics products as more stable. Here R is a rare earth element and Me is a 3d metal.

Значение удельной намагниченности интерметаллидов при рабочих температурах обеспечивается 3d –металлом. Как известно, энергия анизотропии 3d металлов существенно меньше энергии обменных взаимодействий, которые обеспечивают высокие температуры магнитного упорядочения и большую величину намагниченности. Редкоземельные ионы при рабочих температурах намагничены только за счет внутренних полей, определяемых обменным взаимодействием 4f –электронов R и 3d электронов переходных элементов третьего периода. (Будем говорить, что намагниченность редких земель несобственная или наведенная обменными полями 3d металла). Тем не менее, именно присутствие редкой земли обеспечивает высокую анизотропию RCO_5 , т.е. отвечает за согласование магнитной структуры интерметаллида, определенной доменными взаимодействиями, с выделенными направлениями в кристаллической решетке.

Кристаллическая структура RCO_5 гексагональная, ее симметрия описывается пространственной группой $D_{6h}^1(P6/mmm)$. Термомагнитные кривые и зависимости намагниченности от поля в интерметаллидах RCO_5 (так же, как и в RMn_5) показывают, что взаимное расположение магнитных моментов 3d-металла не соответствует простым ферромагнетикам или двухподрешеточным антиферромагнетикам [1-2]. В этом исследовании

мы рассмотрим только относительно простые антиферромагнитные структуры, которые описываются двухкомпонентным параметром порядка (ПП), симметрия которого описывается группой $Y=SO(3)\otimes R\otimes P_3$. Здесь $SO(3)$ – группа вращений в спиновом пространстве, R – группа, порожденная операцией инверсии времени, и P_3 – группа перестановок 3х элементов, изоморфная C_{3V} . Поэтому симметрия собственного антиферромагнитного ПП описывается группой $L=O(3)\otimes C_{3V}$. Полное рассмотрение всех стабильных состояний собственного антиферромагнетика с такой группой Y приведено в [3]. В этой работе мы опишем только те структуры, которые могут граничить с парамагнитной фазой по линии переходов второго рода. Однако, в отличие от [3], в этой работе дана привязка магнитных структур, реализующихся на ионах 3d металлов в обменном приближении, к конкретной кристаллической структуре RCo_5 .

Соразмерные магнитные структуры, индуцируемые ПП, группа симметрии которого $L=O(3)\otimes C_{3V}\cong SO(3)\otimes R\otimes C_{3V}$, могут реализоваться в группе D_{6h}^1 , если вектор \vec{k} , характеризующий мультипликацию примитивной ячейки парамагнитной фазы, принадлежит одной из следующих звезд:

$$\vec{k}_{16} = 0; \quad \vec{k}_{17} = \vec{b}_3 / 2; \quad \vec{k}_{13}^{(1)} = (\vec{b}_1 + \vec{b}_2) / 3; \quad \vec{k}_{15}^{(1)} = (\vec{b}_1 + \vec{b}_2) / 3 + \vec{b}_3 / 2. \quad (1)$$

Нумерация звезд векторов \vec{k} с выделенной симметрией в зоне Бриллюэна дается по Ковалеву [4].

Наиболее наглядно отличия результатов феноменологической теории от результатов расчетов, выполненных в рамках концепции «одного неприводимого представления» [7], или в рамках эквивалентной гипотезы [8] о реализации только «чистых» антиферромагнитных состояний [8], проявляются при описании антиферромагнитных структур, ассоциируемых с вектором \vec{k}_{15} . Структуры, описываемые антиферромагнитным ПП, характеризуемым \vec{k}_{15} и симметрией $L=O(3)\otimes C_{3V}$, индуцируют дополнительные упорядочения, расширенная ячейка для которых определяется векторами $\vec{k}_{13}, \vec{k}_{16}$ и \vec{k}_{17} .

Редкоземельный атом в кристаллической структуре типа RCo_5 занимает однократную правильную систему точек (ПСТ) 1 (a) (0 0 0), Co^I – двукратную ПСТ 2(c) - (1/3 2/3 0) (2/3 1/3 0) и Co^{III} трехкратную ПСТ 3(g) (1/2 0 1/2) (0 1/2 1/2) (1/2 1/2 1/2). Координаты приведены в долях элементарных трансляций гексагональной решетки.

Звезда $\{\vec{k}_{15}\}$ содержит два луча $\vec{k}_{15}^1 = (1/3 \ 1/3 \ 1/3)$, $\vec{k}_{15}^{21} = (-1/3 \ -1/3 \ 1/2)$.

Фактор-группа трансляций образована диагональными матрицами, элементы которых ниже записаны в форме столбца:

$$\vec{a}_1 = \begin{vmatrix} e^{2\pi i/3} \\ e^{-2\pi i/3} \end{vmatrix} \quad \vec{a}_2 = \begin{vmatrix} e^{2\pi i/3} \\ e^{-2\pi i/3} \end{vmatrix} \quad \vec{a}_3 = \begin{vmatrix} -1 \\ -1 \end{vmatrix}$$

Ядро гомоморфизма (элементарные трансляции упорядоченной фазы) $\vec{d}_1, \vec{d}_2, \vec{d}_3$ можно определять операциями сдвига $2\vec{a}_1 + \vec{a}_2$, $\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$, $2\vec{a}_3$. Полученная по генераторам $\vec{d}_1, \vec{d}_2, \vec{d}_3$ конечная группа содержит шесть элементов. Размеры ячейки определяются трансляциями ядра гомоморфизма. Следовательно, расширенная ячейка для \vec{k}_{15} будет в шесть раз больше исходной и будет содержать шесть атомов R, двенадцать атомов Co^I и восемнадцать атомов Co^{II} . Нумерация неэквивалентных по подгруппе $\{2\vec{a}_1 + \vec{a}_2, \vec{a}_1 + 2\vec{a}_2, 2\vec{a}_3\}$ атомов приведена в табл. 1.

Выберем в качестве генераторов расширенной группы звезды вектора \vec{k}_{15} элементы: $\vec{a}_1, \vec{a}_3, h_2 = c_6^z, h_7 = c_2^y, h_{13} = I$ (номера элементов даны по Ковалеву [6]). Действие этих элементов на атомы расширенной ячейки сведется к подстановкам, выписанным в табл. 2. Приводимые перестановочные представления разбиваются на неприводимые следующим образом:

$$T(a) = \tau_1(k_{15}) + \tau_1(k_{13}) + \tau_1(k_{17}) + \tau_1(k_{16});$$

$$T(c) = \tau_5(k_{15}) + \tau_5(k_{13}) + \tau_8(k_{17}) + \tau_1(k_{17}) + \tau_8(k_{16}) + \tau_1(k_{18});$$

$$T(g) = \tau_5(k_{15}) + \tau_4(k_{15}) + \tau_5(k_{13}) + \tau_1(k_{13}) + \tau_{12}(k_{17}) + \tau_4(k_{17}) + \tau_{11}(k_{16}) + \tau_1(k_{16}).$$

Обозначения неприводимых представлений даны по Ковалеву [6]. Выделение антиферромагнитных параметров порядка проведено обычными групповыми методами с помощью операторов проектирования.

Группа $L = SO(3) \otimes R \otimes C_{3V}$ в обменном приближении соответствует ПП, ассоциируемым со следующими неприводимыми представлениями: для ПСТ 1(a) группа L описывает симметрию $\tau_1(k_{15})$ и $\tau_1(k_{13})$; для ПСТ 3(g) - $\tau_4(k_{15})$, $\tau_1(k_{13})$, $\tau_{12}(k_{17})$, $\tau_{11}(k_{16})$. На ПСТ 2(c) ПП с такими трансформационными свойствами нет. Будем предполагать, что во всех позициях находятся магнитные атомы, и последовательно рассмотрим каждый ПП с такой симметрией. При этом будем интересоваться не только структурами в той позиции, на функциях которой построен ПП, но и «наведенными» структурами в других кристаллических позициях, могущих появиться в силу существующих нелинейных соотношений между разными ПП. Для нахождения «индуцированных» представлений выпишем инварианты, линейные по «наведенным» ПП. С ПП $\tau_4(k_{15})$ такие инварианты образуют представление $\tau_4(k_{15})$ с ПП, преобразующееся по $\tau_1(k_{13}) - \tau_1(k_{16})=0$ с $\tau_{12}(k_{17}) - \tau_4(k_{17})$, с $\tau_{11}(k_{16}) - \tau_1(k_{16})$. По представлению $\tau_1(k_{16})$ преобразуется ферромагнитный момент \bar{m} . Инварианты таковы:

$$\text{для } \tau_4(k_{15}) : I_{4,15} = ((\bar{E}_1^2 - \bar{E}_2^2)\bar{E}_1\bar{e}_4(k_{17})) + 2(\bar{E}_1\bar{E}_2)\bar{E}_2\bar{e}_4(k_{17});$$

$$\text{для } \tau_1(k_{13}) : I_{1,13} = (\bar{E}_1^2 - \bar{E}_2^2)(\bar{E}_1\bar{m}) + 2(\bar{E}_1\bar{E}_2)\bar{E}_2\bar{m}_4;$$

$$\text{для } \tau_{12}(k_{17}) : I_{12,17} = (\bar{E}_1^2 - \bar{E}_2^2)(\bar{E}_2\bar{e}_4(k_{17})) + 2(\bar{E}_1\bar{E}_2)(\bar{E}_1\bar{e}_4(k_{17}));$$

$$\text{для } \tau_{11}(k_{16}) : I_{11,16} = (\bar{E}_1^2 - \bar{E}_2^2)(\bar{E}_1\bar{m}) + 2(\bar{E}_1\bar{E}_2)(\bar{E}_2\bar{m}).$$

Здесь каждый раз \bar{E}_i означают компоненты антиферромагнитного ПП, преобразующегося по соответствующему представлению. Ферромагнитный вектор \bar{m} преобразуется по представлению $\tau_1(k_{16})$.

Как и при рассмотрении антиферромагнитных структур гранатов, ограничимся моделью термодинамического потенциала шестой степени (II), которая описывает только три решения I-III.

Для неприводимого представления $\tau_4(k_{15})$ соответствие следующее:

I решение: ($\bar{E}_1 \neq 0, \bar{E}_2 = 0$) на ПСТ 3 (g) возникает конфигурация:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_2 = \bar{M}_6 = \bar{M}_7 = \bar{M}_8 = -\bar{M}_{10} = -\bar{M}_{11} = -\bar{M}_{12} = -\bar{M}_5 = -\bar{M}_{16} = -\bar{M}_{17};$$

$$\bar{M}_4 = \bar{M}_5 = \bar{M}_9 = -\bar{M}_{13} = -\bar{M}_{14} = -\bar{M}_{18}.$$

Предполагая $L \sim (T-T_c)$, получим вблизи T_c зависимость $\bar{e}_4(k_{17}) \sim (T-T_c)^{3/2}$ в силу линейного по $\bar{e}_4(k_{17})$ инварианта. Это так же, как и у гранатов, фаза со «скрытым» антиферромагнитным моментом. Кристаллохимическая ячейка этой структуры увеличена в три раза по сравнению с исходной.

II решение: ($\bar{E}_1 = 0, \bar{E}_2 \neq 0$). В этой фазе соотношение магнитных моментов в ПСТ 3(g) таково:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_2 = \bar{M}_6 = \bar{M}_{12} = \bar{M}_{16} = \bar{M}_{17} = -\bar{M}_3 = -\bar{M}_7 = -\bar{M}_8 = -\bar{M}_{10} = -\bar{M}_{11} = -\bar{M}_{15} \neq \bar{M}_4 = \bar{M}_5 = \bar{M}_{13} = \bar{M}_9 = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{18} = 0$$

Единственная компонента антиферромагнитного момента $\bar{E}_1^{(g)} \sim \bar{M}_1$. В ПСТ 2(c) все

магнитные моменты равны нулю. Кристаллохимическая ячейка здесь также увеличена в три раза. Это «чистая» фаза – все другие магнитные ПП равны нулю.

III решение: ($\bar{E}_1 \perp \bar{E}_2, \bar{E}_1^2 = \bar{E}_2^2$). Этому решению на ПСТ 3(g) соответствует конфигурация, у которой две Киттелевские конфигурации отличаются одна от другой изменением направления магнитных моментов. Соотношение между магнитными моментами атомов следующее:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_2 = \bar{M}_6 = -\bar{M}_{10} = \bar{M}_{16} = -\bar{M}_{11} = -\bar{M}_{15};$$

$$\bar{M}_3 = \bar{M}_7 = \bar{M}_9 = -\bar{M}_{12} = -\bar{M}_{16} = -\bar{M}_{17};$$

$$\bar{M}_1 + \bar{M}_2 + \bar{M}_3 = 0;$$

$$\bar{M}_4 = \bar{M}_5 = \bar{M}_9 = -\bar{M}_{13} = -\bar{M}_{14} = -\bar{M}_{18};$$

$$\bar{M}_1^2 = \bar{M}_3^2 = \bar{M}_4^2.$$

Все магнитные моменты на атомах, находящихся в ПСТ 2(c), равны нулю. Кристаллохимическая ячейка такой конфигурации совпадает с исходной.

Для III, связанного с $\tau_1(k_{13})$ имеем:

I решение: ($\bar{E}_1 \neq 0, \bar{E}_2 = 0$). Магнитные моменты атомов, находящихся в ПСТ 3 (g), связаны так, что находившиеся ранее в одной ПСТ теперь образуют две различные подрешетки. Здесь $\bar{E}_1^{(g)} \sim \bar{M}_1^{(g)} - \bar{M}_4^{(g)}$. В этой фазе $I_{1,13} \neq 0$, поэтому эта фаза будет характеризоваться ферромагнитным моментом. Для ПСТ 3 (g) $\bar{m}^{(g)} \sim 2\bar{M}_1^{(g)} + \bar{M}_4^{(g)}$.

ПСТ 2 (c) в этой фазе образует единую подрешетку, причем $\bar{M}_i = \bar{M}_j, i, j = 1, 2, \dots, 12$, то есть $\bar{m}^{(k)} \sim \bar{M}_1^{(c)}$. Ферромагнитные параметры $\bar{m}^{(c)}$ и $\bar{m}^{(g)}$ преобразуются по одному представлению, поэтому, в силу существования линейного инварианта $(\bar{m}^{(c)}, \bar{m}^{(g)})$ и, считая, что $L \sim (T - T_c)$, получим $\bar{m}^{(g)} \sim \bar{m}^{(c)} \sim (T - T_c)^{3/2}$. Кристаллохимическая ячейка здесь увеличена, по сравнению с исходной в три раза.

II решение: ($\bar{E}_1 = 0, \bar{E}_2 \neq 0$). В этой фазе атомы в ПСТ 3(g) так же образуют две различные подрешетки, причем

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_2 = \bar{M}_6 = \bar{M}_{10} = \bar{M}_{11} = \bar{M}_{15} = -\bar{M}_3 = -\bar{M}_7 = -\bar{M}_9 = -\bar{M}_{10} = -\bar{M}_{17};$$

$$\bar{M}_4 = \bar{M}_5 = \bar{M}_9 = \bar{M}_{13} = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{18} = 0,$$

то есть часть атомов не имеет магнитного момента. В ПСТ 2 (c) атомы тоже имеют средний магнитный момент, равный нулю. Кристаллохимическая ячейка увеличена в три раза.

Решение III: ($\bar{E}_1 \perp \bar{E}_2, \bar{E}_1^2 = \bar{E}_2^2$). Эта фаза имеет треугольную киттелевскую структуру на атомах в ПСТ 3 (g):

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_2 = \bar{M}_6 = \bar{M}_{10} = \bar{M}_{11} = \bar{M}_{15} \neq \bar{M}_3 = \bar{M}_7 = \bar{M}_8 = \bar{M}_{12} = \bar{M}_{16} = \bar{M}_{17};$$

$$\bar{M}_4 = \bar{M}_5 = \bar{M}_9 = \bar{M}_{13} = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{18}; \quad \bar{M}_1 + \bar{M}_2 + \bar{M}_3 = 0;$$

$$\bar{M}_1^2 = \bar{M}_3^2 = \bar{M}_4^2 \text{ и } |\bar{E}|^{(g)} \sim |M|^{(g)}.$$

В ПСТ 2 (c) магнитные моменты всех атомов равны нулю. Эта структура имеет кристаллографическую симметрию, совпадающую с исходной.

Представление $\tau_{12}(k_{17})$:

Решение I: ($\bar{E}_1 \neq 0, \bar{E}_2 = 0$). ПСТ 3 (g) разбита в этой фазе на две подрешетки:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_4 = \bar{M}_7 = \bar{M}_{12} = \bar{M}_{15} = \bar{M}_{18} = -\bar{M}_{10} = -\bar{M}_{13} = -\bar{M}_{16} = -\bar{M}_3 = -\bar{M}_6 = -\bar{M}_9;$$

$$\bar{M}_2 = \bar{M}_5 = \bar{M}_8 = \bar{M}_{11} = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{17} = 0.$$

И, $\bar{E}_1^{(g)} \sim \bar{M}_1^{(g)}$. ПСТ 2 (c) по-прежнему образует единую подрешетку с неупорядоченными магнитными моментами. Симметрия кристаллической ячейки понижена до класса D_{2h} .

Решение II: ($\bar{E}_1 = 0, \bar{E}_2 \neq 0$). Атомы ПСТ 3(g) образуют две независимые подрешетки, но каждая подрешетка теперь антиферромагнитного упорядочения:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_4 = \bar{M}_7 = \bar{M}_3 = \bar{M}_6 = \bar{M}_9 = -\bar{M}_{10} = -\bar{M}_{13} = -\bar{M}_{16} = -\bar{M}_{12} = -\bar{M}_{15} = -\bar{M}_{18};$$

$$\bar{M}_2 = \bar{M}_5 = \bar{M}_8 = -\bar{M}_{11} = -\bar{M}_{14} = -\bar{M}_{17}.$$

Здесь $\bar{E}_1^{(g)} \sim \bar{M}_1^{(g)} - \bar{M}_2^{(g)}$. В этой фазе $I_{12,17} \neq 0$, поэтому $\bar{e}_4(k_{17}) \neq 0$, причем $\bar{e}_4(k_{17}) \sim 2\bar{M}_1^{(g)} + \bar{M}_2^{(g)}$. При принятых предположениях $\bar{e}_4(k_{17}) \sim (T - T_c)^{3/2}$.

ПСТ 2 (c) остается в этой фазе единой неупорядоченной подрешеткой. Симметрия кристаллохимической ячейки понижается до D_{2h} .

Решение III: ($\bar{E}_1 \perp \bar{E}_2, \bar{E}_1^2 = \bar{E}_2^2$). Этому решению в ПСТ 3(g) соответствуют две киттелевские треугольные конфигурации с противоположно направленными спинами:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_4 = \bar{M}_7 = -\bar{M}_{10} = -\bar{M}_{13} = -\bar{M}_{16}; \quad \bar{M}_2 = \bar{M}_5 = \bar{M}_8 = -\bar{M}_{11} = -\bar{M}_{14} = -\bar{M}_{17};$$

$$\bar{M}_3 = \bar{M}_6 = \bar{M}_9 = -\bar{M}_{12} = -\bar{M}_{15} = -\bar{M}_{18};$$

$$\bar{M}_1^2 = \bar{M}_2^2 = \bar{M}_3^2 = -\bar{M}_1 + \bar{M}_2 + \bar{M}_3 = 0.$$

Магнитные моменты атомов, находящихся в ПСТ 2(c), также не упорядочены. Симметрия и размеры кристаллохимической ячейки в этой фазе не меняются по отношению к парафазе.

Представление $\tau_{11}(k_{16})$:

Решение I: ($\bar{E}_1 \neq 0, \bar{E}_2 \neq 0$).

ПСТ 3 (g) в этой фазе разбита на две подрешетки:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_4 = \bar{M}_7 = \bar{M}_{10} = \bar{M}_{13} = \bar{M}_{16} = \bar{M}_3 = \bar{M}_6 = \bar{M}_9 = \bar{M}_{12} = \bar{M}_{15} = \bar{M}_{18};$$

$$\bar{M}_2 = \bar{M}_5 = \bar{M}_8 = \bar{M}_{11} = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{17}.$$

Причем, $\bar{E}_1^{(g)} \sim 2\bar{M}_1 + \bar{M}_2, \quad \bar{m}^{(g)} \sim (T - T_c)^{3/2}$.

В ПСТ 2 (c), в силу тех же соотношений, появляется «наведенный» ферромагнитный момент $\bar{m}^{(c)} \sim \bar{M}_i^{(c)}, \bar{m}^{(c)} \sim (T - T_c)^{3/2}$. Симметрия кристаллохимической ячейки теперь D_{2h} .

Решение II: ($\bar{E}_1 = 0, \bar{E}_2 \neq 0$).

Атомы ПСТ 3 (g) в этой фазе также образуют две разные подрешетки, но одна из них при этом не упорядочена, а другая упорядочена антиферромагнитно:

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_4 = \bar{M}_7 = \bar{M}_{10} = \bar{M}_{13} = \bar{M}_{16} = -\bar{M}_3 = -\bar{M}_6 = -\bar{M}_9 = -\bar{M}_{12} = -\bar{M}_{15} = -\bar{M}_8;$$

$$\bar{M}_2 = \bar{M}_5 = \bar{M}_8 = \bar{M}_{11} = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{17} = 0;$$

$$\bar{E}_2^{(g)} \sim \bar{M}_1.$$

В ПСТ 2(c) атомы не имеют среднего магнитного момента. Кристаллографический класс кристаллографической ячейки здесь тоже D_{2h} .

Решение III: ($\bar{E}_1 \perp \bar{E}_2, \bar{E}_1^2 = \bar{E}_2^2$). Киттелевское упорядочение магнитных моментов атомов, находящихся в ПСТ 3(g):

$$\bar{M}_1 = \bar{M}_4 = \bar{M}_7 = -\bar{M}_{10} = \bar{M}_{13} = \bar{M}_{16}; \quad \bar{M}_2 = \bar{M}_5 = \bar{M}_8 = \bar{M}_{11} = \bar{M}_{14} = \bar{M}_{17};$$

$$\bar{M}_3 = \bar{M}_6 = \bar{M}_9 = \bar{M}_{12} = \bar{M}_{15} = \bar{M}_{18}; \quad \bar{M}_1^2 = \bar{M}_2^2 = \bar{M}_3^2; \quad \bar{M}_1 + \bar{M}_2 + \bar{M}_3 = 0.$$

Причем, магнитные моменты ПСТ 2 (c) не упорядочены. Симметрия кристаллохимической ячейки совпадает с исходной.

Таблица 1:

Структура соединений RCO_5

№	Позиция (a)	Позиция (c)	Позиция (g)
1	(0 0 0)	(1/3 2/3 0)	(1/2 0 1/2)
2	(1 0 0)	(2/3 1/3 0)	(0 1/2 1/2)
3	(2 0 0)	(4/3 2/3 0)	(1/2 1/2 1/2)
4	(0 0 1)	(5/3 1/3 0)	(3/2 0 1/2)
5	(1 0 1)	(7/3 2/3 0)	(1 1/2 1/2)
6	(2 0 1)	(8/3 1/3 0)	(3/2 1/2 1/2)
7		(1/3 2/3 0)	(5/2 0 1/2)
8		(2/3 1/3 1)	(2 1/2 1/2)
9		(4/3 2/3 1)	(5/2 1/2 1/2)
10		(5/3 1/3 1)	(1/2 0 3/2)
11		(7/3 2/3 1)	(0 1/2 3/2)
12		(7/3 2/3 1)	(1/2 1/2 3/2)
13		(8/3 1/3 1)	(3/2 0 3/2)
14			(1 1/2 3/2)
15			(3/2 1/2 3/2)
16			(5/2 0 3/2)
17			(2 1/2 3/2)
18			(5/2 1/2 3/2)

Таблица 2:

Характер преобразования номеров атомов в структуре RCO_5 под действием операций симметрии группы $D_{6h}^1(P6/mmm)$

	Позиция (a)	Позиция (c)	Позиция (g)
a_1^{-1}	(1, 2, 3) (4, 5, 6)	(1, 3, 5) (2, 4, 6) (7, 9, 11) (8, 10, 12)	(1,4,7) (2,5,8) (3,6,9) (10,13,16) (11,14,17) (12,15,18)
a_3	(1, 4) (2, 5)(3, 6)	(1, 7) (2, 8) (3, 9) (4, 10) (5,11) (6,12)	(1,10) (2,11) (3,12) (4,13) (5,14) (6,15) (7,16) (8,17) (9,18)
h_2^{-1}	(1) (2, 3)(4)(5, 6)	(1,6,3) (4,5,2) (7,12,9,10,11,8)	(1,3,2) (7,6,8) (4,9,5) (10,12,11,16,15,17) (13,18,14)
h_7	(1)(2)(3)(4)(5) (6)	(1,6) (2,3) (4,5) (7,12) (8,9) (10,11)	(1,15) (2,11) (3,16) (4,18) (5,14) (6,10) (7,12) (8,17) (9,13)
h_{13}	(1)(2,3) (4) (5, 6)	(1,4) (2,3) (5,6) (7,10) (8,9) (11,12)	(1,16) (2,17) (3,18) (4,13) (5,14) (6,15) (7,10) (8,11) (9,12)

Авторы выражают благодарность ЮФУ 213.01-2014.013ВГ за частичную поддержку работы.

Список использованных источников:

1. *Nassau K., Cherry L.V., Wallace W.E. // J.Phys. Chem. Solids. 1960. V.16. №1/2. P.123;P.131.*
2. *Cherry L.V., Wallace W.E. // American Society For Metals, The Rare Earth Symposium, Lake Arrowhead, California. October 1960, Transactions P.67.*
3. *Ведяшкин А.В. , Гуфан Ю.М. // ФТТ. 1992. Т.34. № 3. С.714.*
4. *Yablonskii D.A. Medvedeva D.A. // Physica B. 1990. V.167 P.125-132.*
5. *Заворотнев Ю.Д. // Физика и техника высоких давлений.1996. Т.6. №1 . С.14-23.*
6. *Ковалев О.В. Таблицы неприводимых представлений пространственных групп. Киев: Наукова Думка, 1961. 155с.*
7. *Изюмов Ю.А., Найш В.Е. , Озеров Р.П. Нейтронография магнетиков.- М: Атомиздат, 1981. – 311 с.*
8. *Яблонский Д.А. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. №1. С. 366.*