

# 探究自旋为 1 和 3/2 的亚铁磁系统出现补偿温度的原因

胡爱元

重庆师范大学物理与电子工程学院, 光电功能材料重庆市重点实验室, 重庆 401331

E-mail: huaiyuanhuyuanai@126.com

2015-12-07 收稿, 2016-02-19 修回, 2016-02-19 接受, 2016-08-08 网络版发表

国家自然科学基金(11404046)、重庆市自然科学基金(cstc2014jcyjA50013)和重庆市教委科研项目(KJ130615)资助

**摘要** 基于格林函数方法, 通过采用Tyablikov和Callen近似分别对系统最近邻交换耦合项和单粒子各向异性项进行退耦, 研究了三维各向异性的混合自旋亚铁磁系统的磁性质, 详细探讨了单粒子各向异性对系统补偿温度的影响, 并对系统出现补偿温度的机理进行了分析. 结果表明: 当小自旋的单粒子各向异性 $D_a$ 增大时, 其子晶格磁化强度随温度下降的速度要比大自旋子晶格的磁化强度慢. 当 $D_a$ 增大到一定值时, 如 $D_a^{\min}$ , 系统出现补偿点, 且补偿点随着 $D_a$ 的增大而减小. 同时, 当其他参数取值变化时,  $D_a^{\min}$ 的大小也随之变化. 这表明 $D_a^{\min}$ 的取值是依赖系统其他参数取值的. 但如果 $D_a$ 为零时, 无论其他参数为何值, 系统都不会出现补偿温度. 因此, 对于本文所研究的亚铁磁模型, 出现补偿温度的前提条件是必须考虑小自旋的单粒子各向异性, 且其取值存在一个最小值, 即:  $D_a^{\min}$ . 当且仅当 $D_a \geq D_a^{\min}$ 时, 系统出现补偿温度, 否则补偿温度消失.

**关键词** 亚铁磁体, 补偿温度, 相变温度, 各向异性, 格林函数

类似于反铁磁体, 亚铁磁体中存在两种磁矩相反的原子, 其晶格可分成两个子晶格, 相同子晶格中的原子磁矩方向相同, 不同子晶格中的原子磁矩方向相反. 与反铁磁体不同的是, 不同子晶格中的原子磁矩大小不相等. 因此, 在低温时, 系统存在一个可测量的非零磁化强度. 而且, 由于不同子晶格中的原子磁矩大小不相等, 它们与温度之间存在的依赖关系是不同的. 因此, 当温度低于相变点时, 系统就有可能在某一温度出现磁化强度为零的情况. 我们把这一温度称为补偿温度, 用 $T_{\text{com}}$ 表示. 一些实验已经表明: 在一些材料中已经观察到了补偿温度, 并且具有广阔的应用前景<sup>[1,2]</sup>.

众多研究人员通过构建不同的理论模型、采用不同的理论方法对系统的补偿温度进行了研究. 如: Li等人<sup>[3,4]</sup>采用格林函数方法对二维层状蜂巢格子的补偿温度进行了研究; Yao等人<sup>[5]</sup>也采用格林函数对二

维蜂巢格子的补偿温度进行了研究; Sarmiento等人<sup>[6,7]</sup>分别采用平均场理论和蒙特卡罗模拟对二维collinear型混合自旋的亚铁磁体的补偿温度和相变温度进行了研究; Mert等人<sup>[8-10]</sup>则在格林函数下, 对二维Néel型混合自旋的亚铁磁体的补偿温度进行了讨论; Žukovič等人<sup>[11,12]</sup>通过蒙特卡罗模拟, 对二维三角格子的补偿温度进行了研究. 还有一些其他的理论方法, 如: 高温展开<sup>[13]</sup>、Oguchi近似<sup>[14,15]</sup>、有效平均场理论<sup>[16,17]</sup>等.

从这些研究中, 不难总结出补偿温度出现的条件, 即: 自旋间次近邻相互作用和/或单粒子各向异性是系统出现补偿温度的必要条件. 通过对上面的研究进行分析, 可以得到一个有趣的问题, 那就是: 对于一个亚铁磁系统, 补偿温度出现的原因是什么呢? 或者说, 是什么因素导致了系统出现补偿温度呢? 对于这样一个问题, 众多研究很少涉及. 本文基

**引用格式:** 胡爱元. 探究自旋为 1 和 3/2 的亚铁磁系统出现补偿温度的原因. 科学通报, 2016, 61: 3155-3162

Hu A Y. The cause of compensation temperature appearance of a spin-1 and spin-3/2 ferrimagnetic system (in Chinese). Chin Sci Bull, 2016, 61: 3155-3162, doi: 10.1360/N972015-01330

于一个三维简单立方格子, 考虑自旋间最近邻相互作用和单粒子各向异性, 对其补偿温度出现的原因进行探究.

### 1 模型和方法

我们的亚铁磁模型是一个三维简单立方晶格, 它由两个子晶格组成, 其中一个子晶格中磁性粒子的自旋量子数为1, 另一个为3/2. 每个自旋量子数为1的磁性粒子, 其最近邻有6个自旋量子数为3/2的磁性粒子, 反之亦然. 因此, 该晶格是一个Néel型结构. 在这里, 采用字母*a*和*b*来分别标识两个子晶格, 其相应的自旋量子数分别采用*S<sub>a</sub>*和*S<sub>b</sub>*来标识. 其哈密顿量为

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \frac{\eta}{2} (S_{ai}^+ S_{bj}^- + S_{ai}^- S_{bj}^+) + S_{ai}^z S_{bj}^z \right] - D_a \sum_i (S_{ai}^z)^2 - D_b \sum_j (S_{bj}^z)^2, \quad (1)$$

这里, *J*描述的是自旋间最近邻交换相互作用.  $\langle i,j \rangle$ 表示对最近邻格点求和.  $\eta$ 是交换各向异性参数, 其取值范围限定在  $0 \leq \eta < 1$ . 当  $\eta=0$  时, 模型退化为三维Ising模型. 显然, 越小的  $\eta$  对应着越强的交换各向异性. *D<sub>a</sub>*和*D<sub>b</sub>*分别描述两个子晶格的单粒子各向异性. 选*z*轴为量子化轴, 则子晶格磁化强度定义为自旋算符的统计平均, 即:  $m_a = \langle S_a^z \rangle, m_b = \langle S_b^z \rangle$ .

根据格林函数方法的一般步骤, 首先要构建格林函数. 在这里, 为了得到子晶格磁化强度, 构建了如下的4个格林函数:

$$G_{SS}^{aa} = \langle \langle S_{ai}^+; e^{uS_{aj}^-} S_{aj}^- \rangle \rangle; G_{SS}^{ba} = \langle \langle S_{bi}^+; e^{uS_{aj}^-} S_{aj}^- \rangle \rangle; G_{SS}^{bb} = \langle \langle S_{bi}^+; e^{uS_{bj}^-} S_{bj}^- \rangle \rangle; G_{SS}^{ab} = \langle \langle S_{ai}^+; e^{uS_{bj}^-} S_{bj}^- \rangle \rangle. \quad (2)$$

这里的*u*是Callen参数<sup>[18]</sup>. 然后建立格林函数的运动方程, 在推导运动方程的过程中, 会得到一组不闭合的高阶格林函数方程组. 为了使格林函数方程组闭合, 必须采用退耦. 在这里, 对交换项, 采用Tyablikov退耦近似<sup>[19,20]</sup>, 即

$$\langle \langle S_i^z S_i^+; e^{uS_j^-} S_j^- \rangle \rangle = \langle S_i^z \rangle \langle \langle S_i^+; e^{uS_j^-} S_j^- \rangle \rangle; l \neq i. \quad (3)$$

对单粒子各向异性项, 采用Anderson-Callen退耦近似<sup>[21,22]</sup>, 即

$$\langle \langle S_i^z S_i^+ + S_i^+ S_i^z; e^{uS_j^-} S_j^- \rangle \rangle = C_F \langle \langle S_i^+; e^{uS_j^-} S_j^- \rangle \rangle; F = a, b, \quad (4)$$

这里

$$C_F = 2m_F \left\{ 1 - \frac{1}{2S_F^2} [S_F(S_F + 1) - \langle (S_F^z)^2 \rangle] \right\}. \quad (5)$$

这里*m<sub>F</sub>*表示的是子晶格磁化强度.

令:

$$\Theta_F(u) = \langle [S_{Fi}^+ e^{uS_{Fj}^-} S_{Fj}^-] \rangle, \quad (6)$$

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle e^{uS_{Fj}^-} S_{Fj}^- S_{Fi}^+ \rangle(k) = \Theta_F(u) \phi_F, \quad (7)$$

这里, *N*是晶格格点数. 对波矢*k*的求和遍及第一布里渊区. 当*u=0*时, 有 $\Theta_F(0)=2m_F$ . 应用谱定理, 通过对 $\langle e^{uS_{Fj}^-} S_{Fj}^- S_{Fi}^+ \rangle$ 进行傅里叶变换得到 $\langle e^{uS_{Fj}^-} S_{Fj}^- S_{Fi}^+ \rangle(k)$ . 得到

$$\langle e^{uS_{Fj}^-} S_{Fj}^- S_{Fi}^+ \rangle(k) = \frac{\Theta_F(u)}{2(\omega_1 - \omega_2)} \left[ (\omega_1 + E_F) \coth \frac{\omega_1}{2k_B T} - (\omega_2 + E_F) \coth \frac{\omega_2}{2k_B T} \right] - \frac{1}{2}, \quad (8)$$

这里,

$$E_a = Jz_1 m_a - D_b C_b; E_b = Jz_1 m_b - D_a C_a; E_3 = Jz_1 m_a \eta \gamma_{1k}; E_4 = Jz_1 m_b \eta \gamma_{1k}, \quad (9)$$

$$\omega_{1,2} = \frac{-(E_a + E_b) \pm \sqrt{(E_a - E_b)^2 + 4E_3 E_4}}{2}, \quad (10)$$

这里, *k<sub>B</sub>*是玻尔兹曼常数. *z<sub>1</sub>*=6是晶格配位数. 其中 $\gamma_{1k} = (1/3)(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ 是晶格结构因子. 利用关系:  $\langle S_{Fi}^- S_{Fi}^+ \rangle = S_F(S_F + 1) - \langle S_F^z \rangle - \langle (S_F^z)^2 \rangle$ , 得到子晶格磁化强度的自治方程<sup>[19,20]</sup>:

$$m_F = \frac{(S_F - \phi_F)(1 + \phi_F)^{2S_F + 1} + (1 + S_F + \phi_F)\phi_F^{2S_F + 1}}{(1 + \phi_F)^{2S_F + 1} - \phi_F^{2S_F + 1}}. \quad (11)$$

这里

$$\phi_F = \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2(\omega_1 - \omega_2)} \left[ (\omega_1 + E_F) \coth \frac{\omega_1}{2k_B T} - (\omega_2 + E_F) \coth \frac{\omega_2}{2k_B T} \right] - \frac{1}{2}. \quad (12)$$

系统总的磁化强度定义为

$$M = m_a + m_b. \quad (13)$$

### 2 结果与讨论

在接下来的讨论中, 将集中探讨交换各向异性和单粒子各向异性对系统补偿温度的影响. 为了便于表述, 将零温时子晶格的磁化强度用*m<sub>a</sub>*(0)和*m<sub>b</sub>*(0)来表示. 并假设两个子晶格单粒子各向异性参数的取值是不相等的.

首先研究当其他参数给定时, 子晶格*a*的单粒子各向异性参数*D<sub>a</sub>*对系统补偿温度的影响. 图1给出了 $\eta$ 和*D<sub>b</sub>*都为0时, 不同*D<sub>a</sub>*下的磁化强度与温度之间的

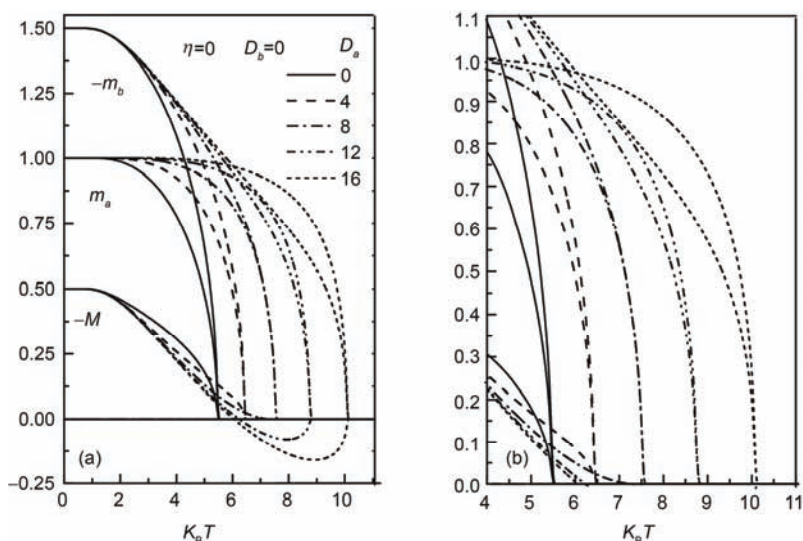


图1 (a) 当 $\eta=0$ 和 $D_b=0$ 时, 对于不同的 $D_a$ , 磁化强度与温度之间的变化关系; (b) 图(a)出现补偿温度附近区域的放大图, 从这个图中可以清楚地看到补偿温度是随着 $D_a$ 的增大而减小的

Figure 1 (a) Temperature dependence of the magnetization for various  $D_a$  when  $\eta=0$  and  $D_b=0$ ; (b) the inset is the enlargement of figure (a) in the regions around compensation point to clearly show that the compensation point lowers with rising  $D_a$

变化关系. 当 $\eta=0$ 意味着系统交换各向异性最强, 同时也表明系统自旋间只存在纵向关联, 没有横向关联. 因此, 从图1看到, 当 $T=0$ 时, 对于子晶格 $a$ , 其磁化强度是饱和的, 即:  $m_a(0)=S_a$ . 在低温时,  $m_a$ 几乎不随 $D_a$ 的改变而变化, 其随温度变化的曲线呈水平状. 并且 $D_a$ 越大, 其水平线越长. 这是因为, 在低温时, 子晶格 $a$ 的热力学扰动很弱, 其能力还不足以使子晶格 $a$ 的自旋发生偏离. 同时, 单粒子各向异性 $D_a$ 又能抑制系统的热扰动. 且 $D_a$ 越大, 其抑制能力越强. 因此, 当 $D_a$ 变大时,  $m_a$ 随温度变化的水平线变长. 但当温度逐渐升高时, 扰动将变得越来越强, 逐渐使自旋发生偏转, 使系统变得无序. 因此, 当温度升高时,  $m_a$ 变小. 同样, 当 $T=0$ 时, 子晶格 $b$ 的磁化强度也是饱和的, 即:  $-m_b(0)=S_b$ . 且在低温时, 其随温度变化的曲线也呈水平状, 但其长度相比 $m_a$ 显得短了很多. 这是因为在 $D_b=0$ , 子晶格 $b$ 的磁化强度更容易受到热扰动的影响. 这使得在相同条件下,  $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要大于 $m_a$ . 换句话说讲, 当 $D_b=0$ 时, 在高温,  $|m_a|$ 与 $|m_b|$ 之间的差异会随着 $D_a$ 的增大而减小, 这就导致了当 $D_a$ 增大时, 总的磁化强度 $-M$ 会随温度升高而变小. 由于子晶格 $b$ 的自旋量子数大于子晶格 $a$ 的自旋量子数, 当 $D_a$ 不大时, 在低于相变温度的范围内,  $|m_a|$ 还是小于 $|m_b|$ . 此时,  $-M \neq 0$ , 即: 系统不会出现补偿温度. 但如果 $D_a$ 值很大时(如 $D_a \geq 6$ ), 在

$T < T_C$ 范围内, 系统总的磁化强度 $M$ 出现了为0的情况, 即:  $m_a$ 和 $-m_b$ 随温度变化的曲线出现一个交叉点. 这个交叉点叫补偿点, 所对应的温度称为补偿温度. 对于不同的 $D_a$ 值, 这些补偿点彼此非常接近, 见图1(a). 但乍一看起来, 这些补偿温度随着的 $D_a$ 的增大而变大, 而实际上, 这些补偿温度是随着 $D_a$ 的增大而减小的. 这是因为当 $D_a$ 继续增大时,  $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要比 $m_a$ 更快, 这使得 $m_a = -m_b \neq 0$ 的关系更容易得到满足, 从而出现了补偿温度随 $D_a$ 的增大而减小. 为了更清楚地看到这一点, 图1(b)放大了图1(a)中出现补偿点的区域. 它清楚地显示了补偿温度随 $D_a$ 的增大而变小, 同时也证实了, 子晶格 $a$ 中单粒子各向异性的增大会使得子晶格 $a$ 的磁化强度随温度下降的速度要比子晶格 $b$ 的磁化强度要慢. 对于相变温度, 由于单粒子各向异性 $D_a$ 抑制了系统的扰动, 因此, 它会随着 $D_a$ 的增大而升高.

图2给出了 $\eta=1$ 和 $D_b=0$ 时, 不同 $D_a$ 下的磁化强度与温度之间的变化关系. 当 $\eta=1$ 时, 系统自旋间的关联不仅包含纵向关联, 也包含横向关联. 而对于 $\eta=0$ , 系统自旋间的关联则不含横向关联. 由于这个原因, 在 $T=0$ 时, 子晶格沿 $z$ 轴方向的磁化强度 $m_a$ 和 $-m_b$ 将不再饱和, 即:  $m_a(0) < S_a$ ,  $-m_b(0) < S_b$ . 关于这一点, 可以从 $D_a=0$ 时,  $m_a(0)$ 与 $-m_b(0)$ 的取值大小清楚地看到, 见图2(a). 当 $D_a$ 增大时, 纵向关联增强. 或者说,  $D_a$ 抑



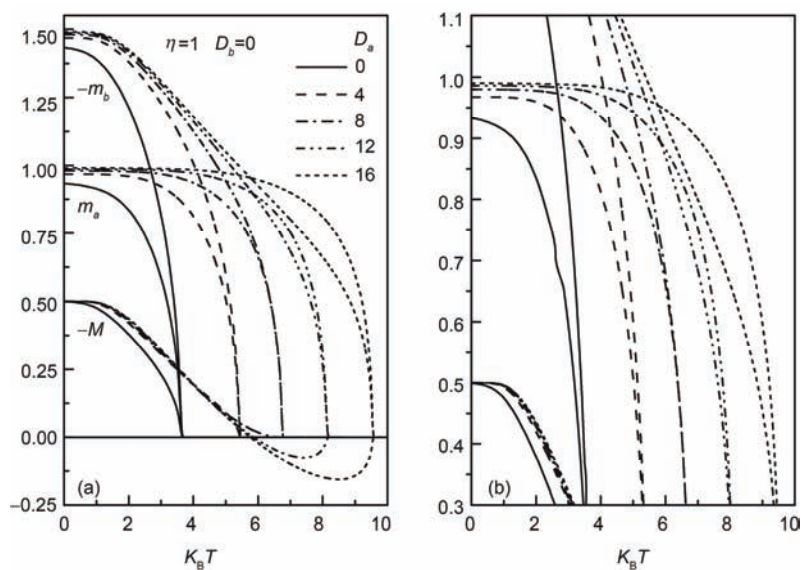


图2 (a) 当 $\eta=1$ 和 $D_b=0$ 时, 对于不同的 $D_a$ , 磁化强度与温度之间的变化关系; (b) 图(a)出现补偿温度附近区域的放大图  
 Figure 2 (a) Temperature dependence of the magnetization for various  $D_a$  when  $\eta=1$  and  $D_b=0$ ; (b) the inset is the enlargement of figure (a) in the regions around compensation point

制系统的横向关联的能力增强, 从而使得系统更加有序. 于是看到了 $m_a(0)$ 的取值也随着 $D_a$ 增大而增大, 并越来越接近其饱和值. 对于 $-m_b(0)$ , 它通过最近邻相互作用 $J$ 的影响, 使得其随着 $D_a$ 增大而增大, 并且越来越接近其饱和值. 相比 $\eta=0$ 的情况, 由于在 $\eta=1$ 时考虑了横向关联, 这导致了在相同的条件下, 磁化强度会更容易趋于无序. 从而出现了两种与 $\eta=0$ 不同的情况. (1) 在低温下,  $\eta=1$ 时,  $m_a(0)$ 与 $-m_b(0)$ 随温度变化的水平线比 $\eta=0$ 时的要短. (2)  $\eta=1$ 的相变温度比 $\eta=0$ 时的要低. 当温度升高时,  $m_a$ 与 $-m_b$ 随温度变化的曲线迅速下降. 和图1一样,  $-m_b$ 随温度升高的曲线下降的速度比 $m_a$ 要快, 且这种趋势会随着 $D_a$ 的增大而变得越发明显, 见图2(a). 当 $D_b \geq 6$ 时,  $m_a$ 与 $-m_b$ 的曲线出现交叉点, 即: 补偿温度出现. 且补偿温度会随着 $D_a$ 的增大而稍稍下降. 同样, 为了更清楚地看到这一点, 在给图2(b)出了出现补偿点附近区域的放大图, 这与图1类似.

图3和4给出了在 $D_a=0$ 时, 不同 $D_b$ 下磁化强度与温度之间的变化关系. 在这种情况下, 大自旋 $S_b=3/2$ 项有一个单粒子各向异性, 而小自旋 $S_a=1$ 项没有. 图3和4分别给出了 $\eta=1$ 和0两种情况. 磁化强度 $m_a(0)$ 与 $-m_b(0)$ 和在低温下 $m_a$ 与 $-m_b$ 的行为与图1和2类似, 产生的原因与图1和2是一样的, 在这里就不再累述. 但有两个特征是图1和2所没有的. 第一个特征是: 当

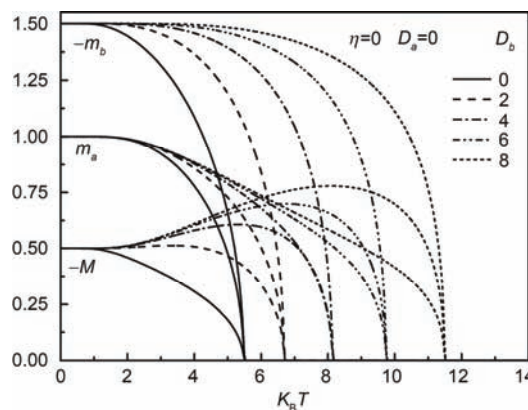


图3 当 $\eta=0$ 和 $D_a=0$ 时, 对于不同的 $D_b$ , 磁化强度与温度之间的变化关系  
 Figure 3 Temperature dependence of the magnetization for various  $D_b$  when  $\eta=0$  and  $D_a=0$

$D_b > 4$ 时, 总的磁化强度 $-M$ 随着温度的升高而增大, 并在接近相变点的附近形成一个凸面曲线. 这是因为子晶格磁化强度 $-m_b$ 有一个单粒子各向异性, 而 $m_a$ 没有. 这导致了子晶格磁化强度 $m_a$ 随温度升高而下降的速度要比 $-m_b$ 快, 从而使得 $m_a$ 与 $-m_b$ 之间的差异随着温度的升高而变大, 使得 $-M$ 随温度升高的曲线形成一个凸面状. 当然, 当温度趋于相变点时,  $-M$ 与 $m_a$ 和 $-m_b$ 一样也是趋于0的. 根据Néel对曲线的分类<sup>[23]</sup>, 这种曲线属于P类曲线. 但当 $D_b < 2$ 时,  $D_b$ 对磁化强度的影响还不是很强, 因此,  $-M$ 随温度升高的

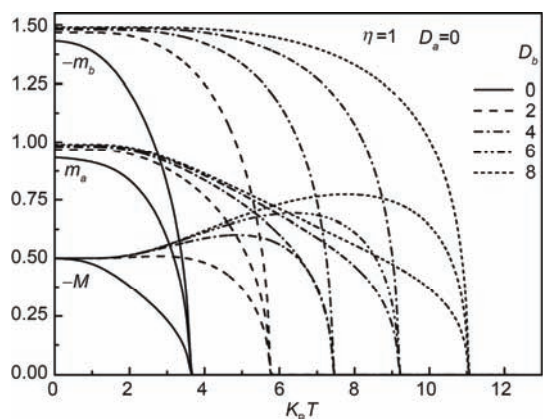


图4 当 $\eta=1$ 和 $D_a=0$ 时, 对于不同的 $D_b$ , 磁化强度与温度之间的变化关系

Figure 4 Temperature dependence of the magnetization for various  $D_b$  when  $\eta=1$  and  $D_a=0$

曲线没有出现凸面状, 这类曲线称为Q类. 显然, 当 $D_b=0$ 时, 其曲线都是属于Q类, 见图1.

第二个特征是: 对于任意的 $D_b$ , 系统不存在补偿点. 原因是, 当 $D_a=0$ ,  $D_b$ 使 $m_a$ 随温度升高而下降的速度比 $-m_b$ 快, 而在 $T < T_c$ 的范围内, 一个直观的结果是 $m_a < -m_b$ , 这就使得 $m_a = -m_b \neq 0$ 关系得不到满足, 这意味补偿点不会出现. 直觉告诉我们, 这两个特征是相互依存的, 其中一个不存在, 另一个也不会出现.

从上面的讨论中不难发现, 单粒子各向异性对系统是否出现补偿点至关重要. 接下来, 为了更加清楚单粒子各向异性对补偿温度的影响, 图5给出了相变温度和补偿温度与单粒子各向异性之间关系. 图中实线描述的是相变温度. 当单粒子各向异性 $D_a$ 和/或 $D_b$ 增大时,  $T_c$ 是升高的. 这是因为单粒子各向异性抑制了系统的量子扰动和热扰动, 使系统变得更加有序, 从而提高了相变温度. 对于交换各向异性 $\eta$ 也是一样的, 即 $\eta$ 越小, 系统的交换各向异性越强, 相变温度越大, 反之亦然.

图5中的虚线描述的是补偿温度的曲线. 当 $D_a$ 为0或很小时, 对于任意的 $\eta$ 和 $D_b$ 值, 系统都不存在补偿温度. 但如果 $D_a$ 超过一个值, 我们把这个值用 $D_a^{\min}$ 来表示, 见图5. 此时, 补偿温度开始出现. 从图5可以看出,  $D_a^{\min}$ 的值是依赖 $\eta$ 和 $D_b$ 的取值的. 当 $\eta$ 从0到1变化时,  $D_a^{\min}$ 是随之减小的, 但其程度非常微弱. 但当 $D_b$ 增大时,  $D_a^{\min}$ 也随之变大. 对于 $D_a \geq D_a^{\min}$ 时, 补偿温度是随 $\eta$ 增大而减小、随着 $D_b$ 增大而增大. 这里要指出的是: 当 $S_a = S_b$ 时, 方程(1)所描述的

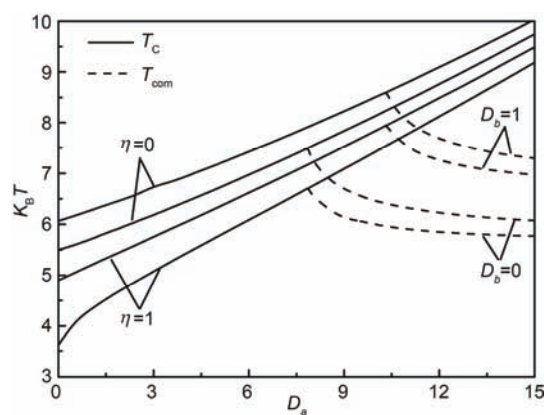


图5 对不同的 $\eta$ 和 $D_b$ , 相变温度和补偿温度与 $D_a$ 之间的变化关系. 实线和虚线分别描述的是相变温度和补偿温度

Figure 5 Compensation and critical temperatures as functions of  $D_a$  for various  $\eta$  and  $D_b$ , where the solid and dash lines represent the critical temperature and compensation temperature, respectively

模型就是一个普通的、考虑了最近邻相互作用的三维各向异性的反铁磁体. 当 $D_a = D_b = 0.01$ 和 $\eta = 0$ 时, 我们得到的相变温度为4.01, 其结果比Linked-cluster series expansion方法的3.19<sup>[24]</sup>和Ratio method的3.19<sup>[25]</sup>要大. 但是与平均场得到的4.0一致<sup>[24]</sup>. 这是因为, 对于Ising模型, 基于格林函数的无归相近似与平均场近似是等价于的, 但由于本文的单粒子各向异性采用了更精确的Callen近似, 所以本文的相变温度值要稍稍大于平均场的结果. 当如果 $D_a = D_b = 0$ 时, 本文得到的相变温度与平均场近似的结果是相等的. 对于当 $D_a = D_b = 0$ 和 $\eta = 1$ , 相变温度为2.64, 其结果接近Linked-cluster series expansion方法(2.74)<sup>[24]</sup>, Ratio method (2.72)<sup>[25]</sup>和High-temperature series expansion method (2.73)<sup>[26]</sup>.

最后, 我们对系统出现补偿温度的原因进行讨论. 以前的研究的结果表明: 次近邻相互作用和/或单粒子各向异性是补偿温度存在的必要条件. 在这篇文章中, 只考虑了最近邻相互作用和单粒子各向异性. 结果表明: 当仅仅考虑子晶格 $b$ 的单粒子各向异性 $D_b$ 时, 系统不存在补偿温度. 而且, 当子晶格 $a$ 的单粒子各向异性 $D_a$ 也被考虑时, 系统也不一定出现补偿点. 这是因为,  $D_b$ 是子晶格 $b$ 自旋 $S_b$ 的单粒子各向异性, 它能抑制系统扰动, 具有使子晶格 $b$ 的自旋沿着量子化轴方向能力. 由于这个原因, 当 $D_b=0$ , 且 $D_b$ 增大时, 子晶格 $b$ 的自旋随温度升高而翻转的能力将会变弱. 而子晶格 $a$ 没有单粒子各向异性, 因此, 相比子晶格 $b$ 的自旋, 子晶格 $a$ 的自旋将会更容易发

生翻转. 这就导致了 $m_a$ 随温度下降的速度一定大于 $-m_b$ . 当 $D_b$ 增大、且 $T < T_C$ 时, 它们之间的差异会随着温度升高而变大, 看图3和4. 而子晶格 $b$ 的自旋量子数又大于子晶格 $a$ 的自旋量子数, 这意味着在相同的条件下有:  $m_a < -m_b$ . 因此, 综合这两个因素, 对于这种情况, 在 $T < T_C$ 时,  $m_a = -m_b \neq 0$ 的关系是不可能得到满足的, 这也就意味着系统补偿点不可能出现. 这就是为什么对于 $D_a = 0$ 时, 无论 $D_b$ 取何值, 系统都没有补偿温度的原因. 对于 $D_a \neq 0$ 时, 也可以沿着相同的思路得到: 当 $D_a$ 增大时,  $-m_b$ 随温度下降的速度一定大于 $m_a$ , 看图1和2. 但由于子晶格 $b$ 的自旋量子数又大于子晶格 $a$ 的自旋量子数, 因此, 对于小的 $D_a$ , 在 $T < T_C$ 时, 系统的子晶格磁化强度仍旧满足 $m_a < m_b$ , 看图1和2. 这就是我们看到的: 当考虑了 $D_a$ 和 $D_b$ 时, 系统仍旧没有出现补偿温度的原因. 但如果 $D_a$ 逐渐增大,  $m_a$ 和 $-m_b$ 之间的差异将会逐渐减小. 当 $D_a$ 增大到一定值 $D_a^{\min}$ , 且 $T < T_C$ 时, 就会出现 $m_a = -m_b \neq 0$ , 看图1和2. 于是, 系统出现了补偿点. 显然,  $D_a^{\min}$ 值会随着 $D_b$ 的增大而变大, 见图5. 对于交换各向异性, 由于它相对单粒子各向异性很弱, 对系统补偿温度的影响很弱, 在这里没有对其进行进一步讨论. 基于

上面的讨论, 对于这个模型, 以前的结论应该被修改为: 小自旋的单粒子各向异性是系统出现补偿温度的前提条件.

### 3 结论

本文基于格林函数方法, 对亚铁磁系统的磁性进行了研究, 详细地探讨了交换各向异性和单粒子各向异性对系统补偿温度的影响. 结果表明: 当 $D_a = 0$ 时, 无论 $\eta$ 和 $D_b$ 取何值, 系统都不可能出现补偿点; 当 $D_a \neq 0$ 时,  $D_a$ 存在一个最小值 $D_a^{\min}$ , 且当 $D_a \geq D_a^{\min}$ 时, 系统出现补偿点, 否则, 补偿点消失. 但这个最小值 $D_a^{\min}$ 的依赖系统其他参数的取值, 如 $\eta$ ,  $D_b$ . 当 $\eta$ 减小时,  $D_a^{\min}$ 是增大的, 但程度非常微弱. 但当 $D_b$ 增大时,  $D_a^{\min}$ 也随之增大. 本文的研究表明: 以前关于补偿温度出现的条件结论应该被修改为: 小自旋的单粒子各向异性是系统出现补偿温度的前提条件.

当 $S_a = S_b$ 时, 模型退化为一个普通的反铁磁模型. 此时, 对于各向异性的情况, 本文得到的相变温度值比其他技巧的结果要大. 而对于各向同性时, 本文的相变温度值与其他结果一致.

**致谢** 感谢与清华大学物理系王怀玉教授的有益讨论.

### 参考文献

- 1 Monsuripur M. Magnetization reversal, coercivity, and the process of thermomagnetic recording in thin films of amorphous rare earth-transition metal alloys. *J Appl Phys*, 1987, 61: 1580–1587
- 2 Buendia G M, Novotny M A. Numerical study of a mixed Ising ferrimagnetic system. *J Phys Condens Matter*, 1997, 9: 5951–5964
- 3 Li J, Du A, Wei G Z. The compensation behavior of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice. *Phys B*, 2004, 348: 79–88
- 4 Li J, Du A, Wei G Z. Low-temperature properties of a mixed spin Heisenberg ferrimagnetic system on a honeycomb lattice. *Phys Stat Sol (b)*, 2003, 240: 610–617
- 5 Yao K L, Li J W, Liu Z L, et al. Magnetic properties of a mixed spin-2 and spin-5/2 Heisenberg ferrimagnetic system on a two-dimensional honeycomb lattice: Green's function approach. *Commun Theor Phys*, 2007, 47: 741–746
- 6 Sarmiento E F, Cressoni J C, Dos Santos R J V. Thermodynamic properties of a mixed spin-1/2 and spin-1 magnetic superlattice. *Int J Mod Phys B*, 2000, 14: 521–532
- 7 Oitmaa J. Ferrimagnetism and the existence of compensation points in layered mixed spin(1/2,1) Ising models. *Phys Rev B*, 2005, 72: 224404
- 8 Mert G, Mert H S. Magnetic properties of a mixed spin-1 and spin-2 Heisenberg ferrimagnetic system: Green's function study. *Phys A*, 2012, 391: 5926–5934
- 9 Mert G. Green's function study of a mixed spin-1 and spin-3/2 Heisenberg ferrimagnetic system. *J Magn Magn Matter*, 2012, 324: 2706–2710
- 10 Mert G. Green's function approach of an anisotropic Heisenberg ferrimagnetic system. *J Magn Magn Mater*, 2013, 347: 105–110
- 11 Žukovič M, Bobák A. Frustrated mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferrimagnets on a triangular lattice. *Phys Rev E*, 2015, 91: 052138

- 12 Žukovič M, Bobák A. Mixed spin-1/2 and spin-1 Ising ferromagnets on a triangular lattice. *Phys A*, 2015, 436: 509–518
- 13 Oitmaa J, Enting I G. A series study of a mixed-spin  $S=(1/2,1)$  ferrimagnetic Ising model. *J Phys Condens Matter*, 2006, 18: 10931–10942
- 14 Bobák A, Dely J, Žukovič M. Phase transition and compensation temperature in the mixed spin-1 and spin-1/2 anisotropic Heisenberg ferrimagnet. *Phys A*, 2011, 390: 1953–1960
- 15 Bobák A, Pokorný V, Dely J. Anomalous behaviour of the magnetic susceptibility of the mixed spin-1 and spin-1/2 anisotropic Heisenberg model in the Oguchi approximation. *J Phys Conf Ser*, 2010, 200: 022001
- 16 Shi X L, Yang Q. Existence of a dynamic compensation temperature of the mixed spin-1 and spin-3/2 Ising model within the effective-field theory. *Phys A*, 2015, 430: 93–100
- 17 Jiang W, Wei G Z, Zhang Z D. Tricritical behavior and magnetic properties for a mixed spin-1 and spin-3/2 transverse Ising model with a crystal field. *Phys Rev E*, 2003, 68: 134432
- 18 Callen H B. Green function theory of ferromagnetism. *Phys Rev*, 1963, 130: 890–898
- 19 Wang H Y. *Green's Function in Condensed Matter Physics*. Beijing: Alpha Science International Ltd and Science Press, 2012
- 20 Fröbrich P, Kuntz P J. Many-body Green's function theory of Heisenberg films. *Phys Rep*, 2006, 432: 223–304
- 21 Fröbrich P, Jensen P J, Kuntz P J. Field-induced magnetic reorientation and effective anisotropy of a ferromagnetic monolayer within spin wave theory. *Eur Phys J B*, 2000, 13: 477–489
- 22 Fröbrich P, Jensen P J, Kuntz P J, et al. Many-body Green's function theory for the magnetic reorientation of thin ferromagnetic films. *Eur Phys J B*, 2000, 18: 579–594
- 23 Néel L. Propriétés magnétiques des ferrites ferrimagnétisme et Antiferromagnétisme. *Ann Phys Paris*, 1948, 3: 137–198
- 24 Pan Kok-Kwei. Magnetic properties of spin-1 Heisenberg antiferromagnet with easy-axis single-ion anisotropy in three dimensions: Linked-cluster series expansion approach. *Phys Rev B*, 2009, 79: 134414
- 25 Gaunt D S, Guttman A J. In *Phase Transitions and Critical Phenomena*. New York: Academic Press, 1974

# The cause of compensation temperature appearance of a spin-1 and spin-3/2 ferrimagnetic system

HU AiYuan

Chongqing Key Laboratory of Photoelectric Functional Materials, College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China

In this paper, we use the double-time Green's function method to study the properties of the mixed spin-1 and spin-3/2 Heisenberg ferrimagnets with exchange anisotropy and single-ion anisotropy on a three-dimensional lattice. We derive the equation of motion of the Green's function by a standard procedure. In the course of this, the higher order Green functions have to be decoupled. For the terms concerning exchange interaction in the Hamiltonian, a Tyablikov or random phase approximation decoupling are used to decoupling the higher order Green functions. For the terms concerning the single-ion anisotropy, we adopt the Anderson-Callen decoupling to decoupling. Based on the above procedure, the effects of the exchange anisotropy and the single-ion anisotropy on the critical and compensation temperature are investigated. The cause of compensation temperature appearance of a spin-1 and spin-3/2 ferrimagnetic system is discussed in detailed. Our results show that, when the large spin  $S_b$  single-ion anisotropy is equal to zero, i.e.,  $D_b=0$ , the drop of the sublattice magnetization  $|m_a|$  with the increase of temperature is slower than the sublattice  $|m_b|$  magnetization of large spin as the single-ion anisotropy  $D_a$  of small spin increases. Under general condition,  $S_b$  is larger than  $S_a$  so that  $|m_a|$  is always smaller than  $|m_b|$ . It means that the difference between  $|m_a|$  and  $|m_b|$  decreases with the increasing of  $D_a$  below the critical temperature. Therefore, as  $D_a$  increases a certain value  $D_a^{\min}$ , we obtain  $m_a=-m_b \neq 0$  below the critical temperature. It shows that the compensation point appears. And the compensation temperature decreases with increasing  $D_a$ . The value of  $D_a^{\min}$  will alter with changing of other parameters in the Hamiltonian. It means that the value of  $D_a^{\min}$  depends on the other parameters in the Hamiltonian. Nevertheless, for  $D_a=0$ , the drop of the sublattice magnetization  $|m_b|$  with the increase of temperature is slower than the sublattice  $|m_a|$  magnetization of large spin when  $D_a$  increases. It shows that, below the critical temperature, the condition of  $m_a=-m_b \neq 0$  cannot be satisfied. This means that as  $D_a=0$ , no matter what value of other parameters in the Hamiltonian, the compensation temperature cannot appear. Therefore, for our model, the prerequisite of the compensation point to occur is that the single-ion anisotropy of small spin quantum number is included. And there is a minimum value for  $D_a$ , i.e.,  $D_a^{\min}$ . When  $D_a$  is beyond  $D_a^{\min}$ , the compensation temperature appears. Otherwise, the compensation point disappears. Meanwhile, it shall be noted that our Hamiltonian will be recover an ordinary three-dimensional Heisenberg antiferromagnetic model with the nearest-neighbor interactions at  $S_a=S_b$ . Our results agree with the high temperature series, the linked-cluster series approach and ratio method results.

**ferrimagnetisms, compensation temperature, critical temperature, anisotropy, Green's function method**

doi: 10.1360/N972015-01330