亚铁磁系统的补偿温度研究

胡爱元^①, 王怀玉^{②*}^① 重庆师范大学物理与电子工程学院, 重庆 401331;^② 清华大学物理系, 北京 100084

*联系人, E-mail: wanghuaiyu@mail.tsinghua.edu.cn

收稿日期: 2015-12-28; 接受日期: 2016-02-25; 网络出版日期: 2016-07-12

国家重点基础研究发展计划(编号: 2012CB927402)和国家自然科学基金(编号: 61275028, 11404046)资助项目

摘要 基于格林函数方法, 通过对交换项和单离子各向异性项分别采用 Tyablikov 退耦近似和 Callen 退耦近似, 我们探究了三维亚铁磁系统补偿温度出现的条件. 结果表明: 大自旋子晶格的磁化强度 $-m_b$ 和小自旋子晶格磁化强度 m_a 都随温度升高而下降, 但两者速度不同. 前者快于后者才能出现补偿温度, 而小自旋的次近邻相互作用 J_{aa} 和/或单离子各向异性 D_a 可促进这一点实现. 对于各种情况研究得到的结论是: 对于所研究的模型, 系统出现补偿温度的必要条件是 D_a 或 J_{aa} 至少有一个不为零, 并且其值要大于某个特定的值. 这个特定的值的大小依赖于系统其他参量的取值.

关键词 亚铁磁, 磁各向异性, 交换和超交换相互作用, 磁序的一般理论和模型

PACS: 75.50.Gg, 75.30.Gw, 75.30.Et, 75.10.-b

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. 这些特点类似于反铁磁体. 不过, 与反铁磁体不同的是, 亚铁磁体中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不同的依赖关系. 因此, 当温度低于相变点时, 系统可能在某一温度出现磁化强度为零的情况. 这一温度称为补偿温度, 也叫补偿点, 用 T_{com} 表示^[1]. 由于在补偿点附近, 只需加一很小的外场, 就能改变系统磁化强度的符号. 因此, 在实验中, 如何使系统出现补偿点

就成了一个非常重要的工艺, 这在热磁记录中有着非常重要的应用^[2,3]. 因此, 研究亚铁磁系统出现补偿温度的原因是有意義的.

理解亚铁磁系统的磁性质的理论方法有: 格林函数方法^[4]、高温展开^[5]、Oguchi 近似^[6]、平均场近似^[7]、蒙特卡罗模拟^[8]、有效场近似^[9]等. 模型则有: 二维平方格子^[10]、二维蜂巢格子^[11]、三角格子^[12]、三维立方格子^[13]等.

在对亚铁磁系统补偿温度的研究时, 这些研究存在一个共同点: 那就是研究要么考虑了单离子各向异性、要么考虑了自旋间次近邻相互作用、要么两者皆考虑. 一些例子可看参考文献^[4-14]. 这些研究在对

引用格式: 胡爱元, 王怀玉. 亚铁磁系统的补偿温度研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2016, 46: 087511

Hu A Y, Wang H Y. The investigation of the compensation temperature of ferrimagnetic systems (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2016, 46: 087511, doi: 10.1360/SSPMA2015-00626

系统出现补偿温度的讨论中认为: 自旋间次近邻相互作用和/或单离子各向异性是系统出现补偿温度的必要条件^[4-14]. 但未明确这两个量是应该出现在哪个子晶格中, 或者是两个子晶格中都应该有. 本文的目的是打算澄清补偿点出现的必要条件.

本文研究三维体心立方晶格的亚铁磁系统, 通过交换各向异性参数来涵盖Ising模型和Heisenberg模型两种类型, 详细讨论次近邻相互作用和单离子各向异性对系统补偿温度的影响. 研究了两种情况: 一种是, 系统无单离子各向异性时, 自旋间次近邻相互作用对系统补偿温度的影响; 另一种情况正相反, 系统无自旋间次近邻相互作用时, 单离子各向异性对补偿温度的影响. 通过对这两种情况的对比, 得到亚铁磁系统出现补偿温度的必要条件.

文章的构架如下: 第1节, 介绍理论模型并给出理论推导; 第2节, 探讨参数对补偿温度的影响, 分析补偿温度出现的条件; 第3节, 给出结论.

1 模型与方法

亚铁磁模型是一个三维体心立方晶格, 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, 其最近邻和次近邻分别有8个自旋量子数为3/2和6个自旋量子数为1的磁性粒子, 反之亦然. 因此, 该晶格的磁结构是一个Néel型结构. 在这里, 采用字母 a 和 b 来分别标识这两个子晶格, 其相应的自旋量子数分别采用 S_a 和 S_b 来标识. 其哈密顿量为

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

这里, J_{ab} 描述的是自旋间最近邻交换相互作用. J_{aa} 和 J_{bb} 分别描述的是子晶格 a 和子晶格 b 的次近邻相互作用. $\langle i,j \rangle$ 和 $[i,j]$ 分别表示对最近邻和次近邻格点求和. η 是交换各向异性参数, 其取值范围为 $0 \leq \eta \leq 1$. 当 $\eta=0$ 时, 模

型退化为Ising模型. 显然, 越小的 η 对应着越强的交换各向异性. D_a 和 D_b 分别描述的是两个子晶格的单离子各向异性. 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: $m_a = \langle S_a^z \rangle$ 和 $m_b = \langle S_b^z \rangle$.

采用量子统计中的多体格林函数方法^[15]. 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的自洽方程, 构建如下的4个格林函数:

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

然后需要建立格林函数运动方程. 在建立运动方程的过程中, 将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^[15,16], 即

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

对单离子各向异性项, 采用Callen退耦近似^[17-20], 即

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

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_F 表示的是 a 或者 b 子晶格磁化强度. 令

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

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

这里 N 是晶格格点数. 对波矢 k 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 $\langle e^{uS_{Fi}^z} S_{Fi}^- S_{Fi}^+ \rangle$ 进行傅里叶变换得 $\langle e^{uS_{Fi}^z} S_{Fi}^- S_{Fi}^+ \rangle(k)$. 所以有

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

这里

$$\begin{aligned} E_a &= J_{bb}z_2m_b(1-\eta\gamma_{2k})-J_{ab}z_1m_a+D_aC_b; \\ E_3 &= J_{ab}z_1m_a\eta\gamma_{1k}; \\ E_b &= J_{aa}z_2m_a(1-\eta\gamma_{2k})-J_{ab}z_1m_b+D_aC_a; \\ E_4 &= J_{ab}z_1m_b\eta\gamma_{1k}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\omega_{1,2} = \frac{-(E_a+E_b) \pm \sqrt{(E_a-E_b)^2 + 4E_3E_4}}{2}, \quad (10)$$

这里 k_B 是玻尔兹曼常数. 晶格配位数 $z_1=8, z_2=6$.

$$\begin{aligned} \gamma_{1k} &= \cos\left(\frac{k_x}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y}{2}\right)\cos\left(\frac{k_z}{2}\right), \\ \gamma_{2k} &= \frac{1}{3}(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z). \end{aligned}$$

利用关系: $\langle S_{Fi}^z S_{Fi}^z \rangle = S_F(S_F+1) - \langle S_{Fi}^z \rangle - \langle (S_{Fi}^z)^2 \rangle$, 我们得到了子晶格磁化强度的表达式^[11,12]

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

这里

$$\begin{aligned} \phi_F &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2(\omega_1 - \omega_2)} \\ &\cdot \left[(\omega_1 - E_F) \times \coth \frac{\omega_1}{2k_B T} - (\omega_2 - E_F) \coth \frac{\omega_2}{2k_B T} \right] - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (12)$$

系统总的磁化强度是两个子晶格磁化强度的简单代数和

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

2 结果与讨论

分别研究次近邻交换作用和单离子各向异性对磁化强度的影响, 即: 首先在 $D_a = D_b = 0$ 时, 探讨 J_{aa} 和 J_{bb} 对磁化强度的影响, 然后研究在 $J_{aa} = J_{bb} = 0$ 时, D_a 和 D_b 对磁化强度的影响.

2.1 $D_a=D_b=0$ 时, J_{aa} 和 J_{bb} 对系统补偿温度的影响

图1(a)给出当 $\eta = 0.5$ 和 $J_{bb} = 0$ 时, 不同 J_{aa} 下的磁化强度与温度之间的变化关系. 从图可以看出, 在低温时, 子晶格 a 的磁化强度曲线 m_a 随着温度的升高呈水平状. 这是因为, 在低温时, 系统的热扰动很弱, 其影响还不足以使子晶格 a 的磁化强度明显下降, 导致了 m_a 随着温度变化的曲线呈水平状. 但当温度进一步升高时, 系

统的扰动越来越强, 磁化强度开始明显下降, 系统无序增强, m_a 随温度的升高而变小. 同时, 发现曲线的水平长度会随着 J_{aa} 的增大而变长. 这是由于 J_{aa} 描述的是子晶格 a 自旋间的相互作用, 因此, 当 J_{aa} 越强, 子晶格 a 的磁化强度越不容易受到影响, 从而出现磁化强度水平曲线延长的现象. 也是由于这个原因, J_{aa} 越大, 相变温度也越高. 对于子晶格 b , 在低温时, 其磁化强度随温度变化的曲线也呈水平状, 但长度比子晶格 a 的要短. 这是因为子晶格 a 有次近邻相互作用, 而子晶格 b 没有. 使得子晶格 b 的磁化强度更容易受温度的影响. 因此, 当 J_{aa} 增大时, $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要大于 m_a . 这就导致了 m_a 和 $-m_b$ 之间的差异会随着 J_{aa} 增大而逐渐变小. 当 J_{aa} 增大到一定值时, 如 $J_{aa} \geq 2$, 子晶格 a 和 b 的磁化强度曲线会出现交叉, 这个交叉点所对应的温度就是补偿温度, 且它随着 J_{aa} 增大而变小. 这表明 J_{aa} 越大, $m_a = -m_b \neq 0$ 的关系更容易满足, 其原因和前面的一样. 同时, 也看到了 $-m_b$ 也是随着 J_{aa} 的增大而变大, 这要归因于最近邻相互作用 J_{aa} 对子晶格 b 的影响.

图1(b)给出了当 $\eta = 0.5$ 和 $J_{aa} = 0$ 时, 不同 J_{bb} 下的磁化强度与温度之间的变化关系. 在这种情况下, 子晶格 b 有次近邻相互作用, 而子晶格 a 没有, 它与图1(a)的情况恰好相反. 但是, 次近邻相互作用 J_{bb} 对子晶格 b 自旋间的影响与次近邻相互作用 J_{aa} 对子晶格 a 自旋间的影响是类似的. 于是它导致了两个特征是图1(a)所没有

图1 不同参数时的磁化强度与温度之间的变化关系. (a) $\eta = 0, J_{bb} = 0, J_{aa} = 0, 1, 2, 3$; (b) $\eta = 0, J_{aa} = 0, J_{bb} = 0, 1, 2, 3$; (c) $J_{aa} = 0, J_{bb} = 0, \eta = 0, 0.4, 0.7, 1$

Figure 1 The magnetization as a function of temperature for different parameters. (a) $\eta = 0, J_{bb} = 0$ and $J_{aa} = 0, 1, 2, 3$; (b) $\eta = 0, J_{aa} = 0$ and $J_{bb} = 0, 1, 2, 3$; (c) $J_{aa} = 0, J_{bb} = 0$ and $\eta = 0, 0.4, 0.7, 1$.

的第一个特征: 当 $J_{bb} \geq 1$ 时, 总的磁化强度 $-M$ 随着温度的升高而变大, 并在接近相变点的附近形成一个凸面. 这是因为子晶格 b 有次近邻相互作用, 而子晶格 a 没有, 使得 $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要小于 m_a , 导致了 $-m_b$ 与 m_a 之间的差异随着温度的升高而变大, 从而使得 $-M$ 随着温度的升高形成一个凸面. 当然, 当温度接近相变点时, 磁化强度 $-M$, $-m_b$ 和 m_a 都是趋于0的. 根据Néel对曲线形状的分类^[1], 这种形状的曲线属于P类曲线. 对于 $J_{bb} < 1$ 时, J_{bb} 对子晶格磁化强度 $-m_b$ 和 m_a 的影响还是很弱. 于是, 我们看到了 $-m_b$ 和 m_a 随温度升高而下降, 此时总的磁化强度也是随着温度的升高而下降, 这类曲线属于Q类曲线. 显然, 图1(a)的曲线都属于Q类曲线.

第二个特征是, 当 $J_{aa} = 0$ 时, 无论 J_{bb} 取何值, 系统都不存在补偿点. 对于这个特征, 我们可以从如下两个方面来理解: (1) 由于 $S_a < S_b$, 因此, 当 $T < T_C$ 时, 一个直观的结果是 $m_a < -m_b$. (2) 当 J_{bb} 增大时, m_a 随温度升高而下降的速度要大于 $-m_b$. 这意味着 m_a 与 $-m_b$ 之间的差异会随着温度的升高而变大. 关于这一点的分析和图1(a)是类似的, 在这里就不再累述. 基于这两点, 当 $J_{aa} = 0$ 时, 无论 J_{bb} 取何值, $m_a = -m_b \neq 0$ 的关系始终都不会得到满足, 这也意味着系统不会出现补偿点. 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.

作为一般的讨论, 这里也讨论交换各向异性对磁化强度的影响, 看当 $J_{aa} = 0$ 和 $J_{bb} = 0$ 时, 系统是否会出现补偿点. 图1(c)给出了交换各向异性 η 与磁化强度之间的变化关系. 从图可以看到, 当 η 从0到1取值时, 系统都不会出现补偿点. 综合图1, 我们发现, 当 $J_{aa} = 0$ 时, 无论 J_{bb} 和 η 取何值, 系统都不会出现补偿点.

为了更清楚地看到参数 J_{aa} , J_{bb} 和 η 对补偿温度和相变温度的影响. 图2和3给出了在不同参数下, 补偿温度和相变温度与参数之间的变化关系. 首先, 看交换各向异性 η 对补偿温度和相变温度的影响. 从图2可以看出, 对于确定的 J_{aa} 和 J_{bb} , 相变温度随着 η 的减小而变大. 这是因为, 越小的 η 值, 对应着越强的交换各向异性. 各向异性抑制了系统的扰动, 导致了一个大的相变温度. 但是, 各向异性对补偿温度的影响却很弱, 尽管它也随着 η 的减小而增大, 但是其程度非常微弱. 尽管如此, 当 $J_{aa} > J_{bb}$ 时, 补偿温度和相变温度都是随着 J_{bb} 增大而迅速变大.

图2 当 $J_{aa} = 4$ 和 $J_{bb} = 0, 0.25, 0.5$ 时, 相变温度和补偿温度与交换各向异性 η 的变化

Figure 2 Critical and compensation temperature as a function of exchange anisotropic parameter η at $J_{aa} = 4$ when $J_{bb} = 0, 0.25, 0.5$.

图3 当 $\eta = 0.5$ 时, 补偿温度和相变温度与 J_{bb} 和 J_{aa} 之间的变化关系. (a) $J_{aa} = 0, 2, 4$; (b) $J_{bb} = 0, 0.25, 0.5$

Figure 3 Compensation and critical temperatures as a function of J_{bb} and J_{aa} at $\eta = 0.5$. (a) $J_{aa} = 0, 2, 4$; (b) $J_{bb} = 0, 0.25, 0.5$.

为了更清楚地明白 J_{aa} 和 J_{bb} 对补偿温度和相变温度的影响, 图3(a)和(b)分别给出了补偿温度和相变温度与 J_{bb} 和 J_{aa} 之间的变化关系. 从图3(a)可以看出, 对于确定的 J_{aa} , 补偿温度和相变温度随着 J_{bb} 的增大而迅速增大, 但前者更剧烈. 但当 J_{bb} 增大到一定值时, 系统的补偿点消失. 对于确定的 J_{bb} , 补偿温度和相变温度随着 J_{aa} 的增大而增大. 但是, 当 $J_{aa} = 0$ 时, 无论 J_{bb} 取何值, 系统都不会出现补偿点, 这与图1(b)的结果是一致的.

图3(b)描述了 J_{aa} 与补偿温度与相变温度之间的关系. 从图可以看出, 当 J_{aa} 很小时, 无论其他参数为何值

时, 系统都不存在补偿点. 但当 J_{aa} 增大到一定值时, 这里用 J_{aa}^{min} 来表示, 系统出现补偿点. 这表明: J_{aa} 存在一个最小的 J_{aa}^{min} 值, 当且仅当 $J_{aa} \geq J_{aa}^{\text{min}}$ 时, 系统出现补偿点, 否则系统不存在补偿点. 从图中发现, J_{aa}^{min} 的值随着 J_{bb} 的增大而变大. 结合图2(b), 当系统出现补偿点时, 补偿温度会随着 η 的增大而减小, 这意味着 J_{aa}^{min} 的取值是依赖系统其他参数的取值. 关于 J_{aa} 对相变温度的影响, 在图3(a)中已叙述, 这里就不再赘述了.

2.2 $J_{aa}=J_{bb}=0$ 时, D_a 和 D_b 对系统补偿温度的影响

和前面的讨论一样, 首先讨论单离子各向异性对磁化强度的影响. 图4(a)给出了当 $D_b = 0$ 时, 单离子各向异性 D_a 与磁化强度之间的变化关系. 从图4(a)可以看出, 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, 与图1(a)类似. 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, 单离子各向异性 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. 当温度逐渐升高时, 扰动将变得越来越强, 自旋逐渐开始发生偏转, 系统无序增强, 磁化强度随温度升高而减少. 类似地, 在低温时, 子晶格磁化强度 $-m_b$ 随温度升高也呈水平状, 但其水平长度与 m_a 相比要短. 这是因为子晶格 a 有单离子各向异性, 而子晶格 b 没有. 同样, 也是由于这个原因, 当 D_a 增大的速度越快, $-m_b$ 随温度升高而下降的速度比 m_a 也越快, 它们之间的差异将会随着 D_a 的增大变得越来越小. 当 D_a 增大到一定值时, 如: $D_a \geq 12$, m_a 与 $-m_b$ 随温度变化的曲线出现交叉, 这意味着系统出现补偿温度. 对于不同的 D_a , 补偿温度是随着 D_a 的增大而下降的. 这表明, D_a 越大, $m_a = -m_b \neq 0$ 的关系越容易得到满足.

图4(b)分别给出了当 $D_a = 0$, 单离子各向异性 D_b 与磁化强度之间的变化关系. 图4(b)中曲线的表现行为与图1(b)是类似的, 就不再赘述. 这里需要指出的是: 它们产生的原因是不同的. 对于图1(b), 它是由于 J_{aa} 的增强, 使得子晶格 b 的自旋更不容易受到影响, 导致了 m_a 随温度升高而下降的速度要比 $-m_b$ 快. 对于图4(b), 根据对图4(a)的分析, 它是由于单离子各向异性抑制了系统的扰动, 使得 m_a 随温度升高而下降的速度要比 $-m_b$ 快. 它们的物理机制是不同的. 尽管如此, 当 $D_a = 0$ 时, 无论 D_b 取何值, 系统都不可能出现补偿点.

为了清楚地看到单离子各向异性对补偿温度和相变温度的影响, 图5给出了单离子各向异性参数与补偿温度和相变温度之间的变化关系. 当 D_a 为0或很小时, 对于任意的 D_b 值, 系统都不存在补偿温度. 但如果 D_a 的取值超过某一个值时, 把这个值用 D_a^{min} 来表示, 见图5, 此时, 系统开始出现补偿温度. 当 D_b 增加时, D_a^{min} 也随之变大. 这意味着 D_a 存在一个最小值, 当且仅当 $D_a \geq D_a^{\text{min}}$ 时, 系统才能出现补偿温度. 同时, 也发现补偿温度是随着 D_b 增大而增大. 这意味着 D_a^{min} 的值是依赖 D_b 的取值. 对于交换各向异性, 这里没有讨论, 原

图4 当 $\eta = 0.5$ 时, 磁化强度与温度之间的变化关系. (a) $D_a = 0, 6, 12, 18$; (b) $D_b = 0, 5, 15, 20$

Figure 4 The magnetization as a function of temperature at $\eta = 0.5$. (a) $D_a = 0, 6, 12, 18$; (b) $D_b = 0, 5, 15, 20$.

图5 当 $\eta = 0.5$ 和 $D_b = 0, 1.5, 3$, 补偿温度和相变温度与 D_a 之间的变化关系

Figure 5 Compensation and critical temperatures as functions of D_a for $\eta = 0.5$ and $D_b = 0, 1.5, 3$.

因是其结果与图1(c)和图2(b)的结果类似.

注意到, 当 $S_a = S_b$ 和 $J_{aa} = J_{bb} = 0$ 时, 方程(1)所描述的模型就是一个普通各向异性的三维体心立方格子的反铁磁体. 当 $\eta = 0$ 和 $D_a = D_b = 0.01$, 得到的相变温度为5.35 K. 其结果比团簇展开法的4.45 K^[20]和比率方法的4.45 K^[21]要大, 但是与平均场得到的5.32 K一致^[1]. 这是因为, 在Ising模型时, 采用的Tyablikov退耦近似与平均场近似是等价的^[22]. 由于此处有一个单离子各向异性, 所以数值稍大一点. 如果 $D_a = D_b = 0$ 时, 相变温度与平均场近似的结果是严格相等的. 对于 $\eta = 1$ 和 $D_a = D_b = 0$ 时, 相变温度为3.85 K. 这一数值接近团簇展开法的3.92 K^[20]、比率方法的3.95 K^[21]和高温展开法的3.93 K^[23].

2.3 出现补偿温度原因的一般性讨论

最后, 从物理上对系统出现补偿温度的原因进行讨论. 这里, 实际上是分了两种情况来对其进行了讨论. 第一种情况: 无单离子各向异性时, 考虑了次近邻相互作用, 见图1-3. 在这种情况下, 结果表明: 小自旋间的次近邻相互作用(即 J_{aa})是系统出现补偿点的前提条件, 见图1和3(b). 第二种情况: 无次近邻相互作用时, 考虑单离子各向异性对磁化强度的影响, 见图4和5. 对于此种情况, 结果显示: 小自旋的单离子各向异性(即 D_a)是系统出现补偿点的前提条件, 见图4和5. 对比这两种情况, 发现它们之间存在一个共同点: 那就是 J_{aa} 和 D_a 都具有使 $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要比 m_a 快的能力, 这就是一般的研究认为次近邻相互作用和/或单离子各向异性是系统出现补偿温度为必要条件的原因. 但这里需要指出的是: 并不是考虑了次近邻相互作用和/或单离子各向异性, 系统就会出现补偿温度, 见图1(b)和4(b). 这里的次近邻相互作用和/或单离子各向异性必须是小自旋的次近邻相互作用和/或单离子各向异性. 因此, 以前关于亚铁磁系统出现补偿温度的条件应该被修改为: 小自旋次近邻相互作用和/或单离子各向异性是亚铁磁系统出现补偿温度的前提条件.

就物理机制而言, 前者是因为 J_{aa} 越大, 子晶格 a 的

自旋翻转越困难, 导致了 $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要比 m_a 快. 后者则是因为 D_a 抑制了子晶格 a 的自旋间的扰动, 从而使得 $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要比 m_a 快. 显然, 这两者的物理机制是不同的. 尽管如此, 但它们具有的这种相同能力却是亚铁磁系统出现补偿温度的原因. 因此, 我们认为, 对于一般的亚铁磁系统出现补偿温度的条件是: 必须至少存在一个额外参数使得 $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要比 m_a 快. 只有这样, 在温度低于相变点时, 才能使 $m_a = -m_b \neq 0$ 的关系得到满足. 此时, 系统才能出现补偿点, 否则不存在补偿点. 对于这个模型, 这个额外的参数就是小自旋的单离子各向异性和/或它的次近邻相互作用. 这个结论可以被推广到Néel型三维简单立方格子和Néel型二维平方格子. 对于其他模型, 则要重新研究. 但有一点需要指出的是: 对于其他类型的亚铁磁模型, 如果系统出现补偿点, 一定至少存在一个额外的参数, 使得 $-m_b$ 随温度升高而下降的速度要比 m_a 快. 否则, 系统是不会出现补偿点的.

3 结论

在这篇文章中, 采用格林函数方法对三维体心立方格子的亚铁磁系统出现补偿温度的原因进行了研究. 通过分别探讨次近邻相互作用和单离子各向异性对补偿温度的影响, 得到了亚铁磁系统出现补偿的原因, 即: 亚铁磁系统之所以出现补偿温度, 是因为系统至少存在一个能使大自旋的子晶格磁化强度随温度下降的速度比小自旋子晶格磁化强度要快的参量, 且当这个参量取到一定值时, 两个子晶格随温度变化磁化强度的曲线能交叉. 对于这篇文章所研究的模型, 这个参量为小自旋的次近邻相互作用和/或单离子各向异性. 结论是: 小自旋子晶格的单离子各向异性 D_a 或次近邻交换 J_{aa} 这两者至少有一个不为零并且在某个特定值以上是系统出现补偿温度的必要条件. 我们的结论能够推广到Néel型的三维简单立方晶格和Néel型的二维平方晶格. 对于其他模型, 也可以采用本文的思路进行探究.

参考文献

- 1 Néel L. Propriétés magnétiques des ferrites ferrimagnétisme et Antiferromagnétisme. Ann Phys, 1948, 3: 137–198

- 2 Kiwi M. Exchange bias theory. *J Magn Magn Mater*, 2001, 234: 584–595
- 3 Berkowitz A E, Takano K. Exchange anisotropy—a review. *J Magn Magn Mater*, 1999, 200: 552–570
- 4 Li J, Wei G Z, Du A. Green function study of a mixed spin-3/2 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model. *J Magn Magn Mater*, 2004, 269: 410–418
- 5 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
- 6 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
- 7 Deviren B, Keskinb M, Canko O. Kinetics of a mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising ferrimagnetic model. *J Magn Magn Matter*, 2009, 321: 458–466
- 8 Aydiner E, Yuksel Y, Kis-Cam E, et al. Dependence on dilution of critical and compensation temperatures of a two-dimensional mixed spin-1/2 and spin-1 system. *J Magn Magn Mater*, 2009, 321: 3193–3197
- 9 Wei J, Guan H Y, Wang Z, et al. Nanoparticle with a ferrimagnetic interlayer coupling in the presence of single-ion anisotropis. *Phys B*, 2012, 407: 378–383
- 10 Hu A Y, Zhang A J. The magnetic properties of a mixed spin-1/2 and spin-1 Heisenberg ferrimagnetic system on a two-dimensional square lattice. *J Magn Magn Mater*, 2016, 399: 22–25
- 11 Li J, Wei G Z, Du A. Compensation phenomena of a mixed spin-2 and spin-1/2 Heisenberg ferrimagnetic model: Green function study. *Phys B*, 2005, 368: 121–130
- 12 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
- 13 Ertas M, Kocakaplan Y, Kantar E. Magnetic properties of a spin-1 triangular Ising system. *J Magn Magn Mater*, 2015, 386: 1–7
- 14 Zaim A, Kerouad M, Boughrara M. Monte Carlo study of themagnetic behavior of a mixed spin(1,3/2) ferrimagnetic nanoparticle. *Solid State Commun*, 2013, 158: 76–81; 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 Wang H Y. Green's Function in Condensed Matter Physics. Beijing: Alpha Science International Ltd and Science Press, 2012
- 16 Callen H B. Green function theory of ferromagnetism. *Phys Rev*, 1963, 130: 890–898
- 17 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
- 18 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
- 19 Fröbrich P, Kuntz P J. Many-body Green's function theory of Heisenberg films. *Phys Rep*, 2006, 432: 223–304
- 20 Anderson F B, Callen H B. Statistical mechanics and field-induced phase transitions of the Heisenberg antiferromanet. *Phys Rev*, 1964, 136: A1068–A1087
- 21 Kok-Kwei P. 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
- 22 Gaunt D S, Guttman A J. In Phase Transitions and Critical Phenomena. New York: Academic Press, 1974
- 23 Kok-Kwei P. Magnetic phase transitions in Heisenberg antiferromagnetic films with cubic lattices. *Phys Rev B*, 2005, 71: 134524

The investigation of the compensation temperature of ferrimagnetic systems

HU AiYuan¹ & WANG HuaiYu^{2*}

¹ School of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China;

² Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Based on the Green's function method, by using the Tyablikov and Callen approximation to decouple the exchange interactions and single-ion anisotropy, respectively, we study the condition of the compensation temperature appearance of the three-dimensional ferrimagnetic system. Our results show that both $-m_b$ in the large spin sublattice and m_a in the small spin sublattice decrease with increasing temperature, but their speed are different. When the former larger than latter, the compensation temperature can appear. Our investigation show that the next-nearest neighbor exchange J_{aa} and/or single-ion anisotropy D_a of small spin can help our to achieve it. Therefore, our conclusion: for our ferrimagnetic system, the prerequisite of the compensation temperature appearance is that the system must at least have a nonzero J_{aa} or single-ion anisotropy D_a . And its value should be beyond a certain value which depends on other parameters in Hamiltonian.

ferrimagnetics, magnetic anisotropy, exchange and superexchange interactions, general theory and models of magnetic ordering

PACS: 75.50.Gg, 75.30.Gw, 75.30.Et, 75.10.-b

doi: [10.1360/SSPMA2015-00626](https://doi.org/10.1360/SSPMA2015-00626)