

# Антиферромагнитные примесные состояния в полугограниченном ферромагнетике при различных ориентациях поверхности относительно осей кристалла

Т. Г. Петрова

*Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины  
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61164, Украина  
E-mail: petrova@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 30 августа 2000 г.

Исследованы спиновые состояния, локализованные на антиферромагнитной примеси, находящейся на поверхности полугограниченного гейзенберговского ферромагнетика или в одном из его подповерхностных слоев. Рассмотрены различные случаи ориентации поверхности относительно осей кристалла. Энергии и собственные функции локализованных примесных состояний найдены в зависимости от параметров задачи. Обнаружено, что в рассматриваемой системе всегда существует определенный подповерхностный слой, расположение примеси в котором является энергетически наиболее выгодным. Расстояние этого слоя от поверхности полностью обуславливается направлением поверхностной плоскости относительно осей магнитной решетки.

Досліджено спінові стани, локалізовані на антиферромагнітній домішці, розташованій на поверхні напівобмеженого гейзенбергівського ферромагнетика або в одному з його підповерхневих шарів. Розглянуто різні випадки орієнтації поверхні відносно вісей кристалу. Енергії та власні функції локалізованих домішкових станів знайдено в залежності від параметрів задачі. Виявлено, що в розглянутій системі завжди існує визначений підповерхневий шар, розташування домішки в якому є енергетично найбільш вигідним. Відстань цього шару від поверхні цілком обумовлюється напрямком поверхневої площини відносно вісей магнітної ґратки.

PACS: 76.50.+g

## 1. Введение

Свойства магнитоупорядоченных кристаллов с магнитными примесями относятся к одной из наиболее интенсивно исследуемых областей теории магнетизма [1–9]. Особый интерес вызывает случай ферромагнетика с антиферромагнитной (АФМ) примесью, так как вопрос об основном состоянии такой системы требует отдельного рассмотрения. Значительное количество работ было посвящено решению этой проблемы в безграничном ферромагнетике [1–7]. В результате было установлено, что искомое основное состояние является локализованным на примеси и имеет энергию, лежащую ниже непрерывного спектра возбуждений системы.

В полугограниченной решетке характеристики приповерхностных примесных состояний обу-

славляются свойствами поверхности и могут существенно отличаться от случая примеси, находящейся в глубине кристалла. Это обстоятельство приводит, в частности, к зависимости энергии основного состояния полугограниченного ферромагнетика с АФМ примесью от положения последней относительно поверхности. Попытка проанализировать указанную зависимость в простейшем случае поверхности типа (001) в простой кубической решетке предпринималась в работе [9]. Однако представленные в этой работе соотношения между энергиями примесных уровней и сделанные на их основе выводы адекватны физике задачи только в отдельной части рассмотренной области значений обменных параметров.

Одним из естественных свойств поверхности, способным оказать заметное влияние на особен-

ности примесных состояний в полуограниченной системе, является ориентация поверхностной плоскости относительно осей кристалла. Исследование этого влияния на АФМ примесные состояния в полуограниченном ферромагнетике и составляет задачу настоящей работы. Анализ примесных уровней в энергетическом спектре системы проводится при любых значениях параметров обменных взаимодействий, соответствующих рассматриваемому случаю. Особое внимание уделяется выяснению вопроса об энергетически наиболее выгодном положении примеси по отношению к поверхности. Определяется зависимость этого положения от направления поверхностной плоскости в магнитной решетке.

Энергии и собственные функции локализованных примесных состояний находятся с помощью вычислительного метода якобиевых матриц, детально разработанного в области динамики решетки [10–13] и неоднократно применявшегося позднее к магнитоупорядоченным системам [6–9, 14, 15]. Этот метод позволяет обойтись без спиноволнового приближения, непригодного в данном случае, и решить поставленную квантовую задачу в терминах операторов спиновых отклонений.

## 2. Описание модели и гамильтониан системы

Рассмотрим полуограниченный гейзенберговский ферромагнетик, магнитные атомы которого обладают спином  $S = 1/2$  и образуют простую кубическую решетку со взаимодействием ближайших соседей. Считается, что система имеет свободную поверхность типа  $(n-10)$  с различными возможными ориентациями поверхностной плоскости относительно осей кристалла  $n = 0, 1, 2, \dots$ , изображенными на рис. 1. Такая модель поверхности позволяет получить наглядные результаты, которые потом несложно обобщить на случай произвольных (не только целочисленных) значений  $n$ .

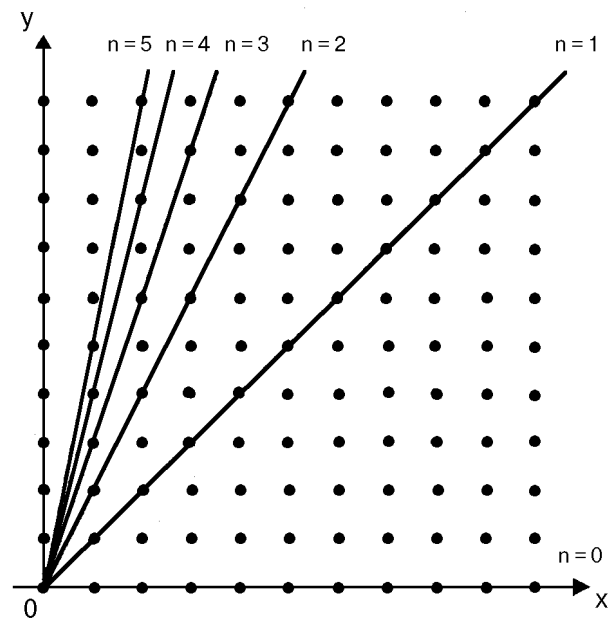


Рис. 1. Поверхности типа  $(n-10)$  в простой кубической решетке ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ; ось  $z$  направлена перпендикулярно плоскости рисунка).

Поместим в один из узлов магнитной решетки АФМ примесь, отличающуюся от регулярных атомов отрицательной величиной обменного взаимодействия с соседними спинами. Заметим (см. рис. 1), что в выбранной модели все поверхностные плоскости с разными значениями  $n$  пересекаются вдоль оси  $z$ , а параллельные им  $p$ -ые подповерхностные слои — вдоль оси  $(0pz)$ , где  $p$  — номер слоя относительно поверхности. Поэтому дальнейшее исследование удобно проводить, помещая примесь в узел с координатами  $(0p0)$ , где она будет находиться в слое с номером  $p$ , одинаковым сразу для всей группы поверхностей  $n = 0, 1, 2, \dots$

С учетом изложенных выше соображений гамильтониан Гейзенберга для рассматриваемой системы принимает вид

$$H = -I \sum_{\mathbf{m}(m_y \geq nm_x)} \mathbf{S}_{\mathbf{m}} [\mathbf{S}_{\mathbf{m}+(001)} + \mathbf{S}_{\mathbf{m}+(010)} + \mathbf{S}_{\mathbf{m}+(-100)}] + (I - I') \mathbf{S}_{(0p0)} \times \\ \times [\mathbf{S}_{(0p1)} + \mathbf{S}_{(0p-1)} + \mathbf{S}_{(0p+10)} + \mathbf{S}_{(-1p0)} + (1 - \delta_{p0})\mathbf{S}_{(0p-10)} + \Theta(p-n)\mathbf{S}_{(1p0)}] . \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{S}_{\mathbf{m}}$  — оператор спина магнитного атома, находящегося в  $\mathbf{m}$ -ом узле решетки (магнитный момент системы направлен по оси  $z$ );  $I > 0$  и  $I' < 0$  — интегралы обменных взаимодействий между спинами регулярных атомов и спина примеси с соседями; величина  $n = 0, 1, 2, \dots$  обозна-

чает различные направления поверхностной плоскости, а индекс  $p = 0, 1, 2, \dots$  нумерует параллельные поверхности слои, включая поверхность;  $\delta_{p0}$  — символ Кронекера;  $\Theta(p-n)$  — ступенчатая функция, определяемая как

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (2)$$

Гамильтониан (1) коммутирует с оператором  $z$ -проекции полного спина системы, поэтому пространство собственных функций оператора  $H$  можно разбить на подпространства, которые характеризуются определенными значениями  $S_H^z$  этой  $z$ -проекции. Собственное состояние оператора  $H$ , в котором все атомные спины параллельны друг другу, принадлежит подпространству с максимальным значением  $S_H^z = NS$  и имеет энергию

$$E_0 = -IS^2 \{3N - (\eta + 1)[5 - \delta_{p0} + \Theta(p - n)]\}, \quad (3)$$

где  $\eta = -I'/I$ ;  $N$  — число атомов в решетке. В дальнейшем собственный вектор, описывающий это состояние, будем обозначать символом  $|0\rangle$ , а энергию  $E_0$  выберем в качестве начала отсчета всех энергий системы.

В отсутствие примесей ( $I' = I$ ) или при наличии в кристалле ферромагнитного дефекта ( $I' > 0$ ) вектор  $|0\rangle$  отвечает основному состоянию ферромагнетика (см., например, [1]). В случае АФМ примеси с величиной спина  $S = 1/2$  основное состояние принадлежит подпространству одночастичных возбуждений системы со значениями  $S_H^z = NS - 1$  [1–4]. В этом состоянии спиновые отклонения, локализованные на примеси и соседних атомах, велики, поэтому спин-волновое приближение непригодно, и для решения задачи об основном состоянии системы (1) удобно воспользоваться описанным ниже методом якобиевых матриц.

### 3. Метод нахождения энергий и собственных функций локализованных состояний

Метод якобиевых матриц был подробно представлен в ряде работ [7,8,10–15], поэтому в данном разделе достаточно ограничиться кратким изложением вычислительной процедуры. Используемый метод основан на выборе в одном из подпространств оператора  $H$ , описывающего рассматриваемую систему, некоторого вектора  $\mathbf{g}_0$  определенного вида. С помощью этого вектора строится специальное циклическое подпространство, инвариантное относительно оператора  $H$ :

$$\mathbf{g}_0, H\mathbf{g}_0, H^2\mathbf{g}_0, \dots \quad (4)$$

$\mathbf{g}_0$  называют вектором, порождающим данное циклическое подпространство. Методом последовательной ортогонализации векторов (4) строится ортонормированный базис  $\{\mathbf{g}_l\}$  в циклическом

подпространстве ( $l = 0, 1, 2, \dots$ ). Матрица оператора  $H$  в этом базисе принимает якобиевую форму:

$$H_{ll'} = \begin{pmatrix} a_0 & b_0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ b_0 & a_1 & b_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & b_1 & a_2 & b_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & b_2 & a_3 & b_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Энергетический спектр оператора  $H$  в выбранном базисе оказывается простым (невырожденным), т.е. каждому собственному значению энергии  $\epsilon$  отвечает единственная собственная функция  $\Psi(\epsilon)$ , которую можно представить в виде разложения по базису  $\{\mathbf{g}_l\}$ :

$$\Psi(\epsilon) = \mu(\epsilon) \sum_{l=0}^{\infty} P_l(\epsilon) \mathbf{g}_l. \quad (6)$$

Здесь  $\mu(\epsilon)$  — нормировочный множитель;  $P_l(\epsilon)$  — многочлены  $l$ -й степени относительно  $\epsilon$ , удовлетворяющие рекуррентным соотношениям

$$b_l P_{l+1}(\epsilon) = (\epsilon - a_l)P_l(\epsilon) - b_{l-1} P_{l-1}(\epsilon) \quad (7)$$

с начальными условиями  $P_{-1}(\epsilon) = 0$ ,  $P_0(\epsilon) = 1$ .

Если в системе имеются локализованные состояния, лежащие вне сплошного спектра собственных значений оператора  $H$ , то их энергии найдутся из уравнения

$$P_l(\epsilon) = 0. \quad (8)$$

Скорость сходимости локальных решений уравнения (8) к истинным значениям энергий при  $l \rightarrow \infty$  определяется степенью локализации рассматриваемого состояния. Выражения (6), (8) удобно применять к состояниям с высокой степенью локализации, так как при этом для получения результатов с хорошей точностью достаточно ограничиться небольшими (порядка нескольких единиц) значениями  $l$ . Именно такая ситуация возникает в задаче о состояниях, локализованных на АФМ примеси с величиной спина  $S = 1/2$ , находящейся в ферромагнитном кристалле. В этом случае спиновые отклонения хорошо локализованы уже в первой координационной сфере примеси [1,5].

Следует также заметить, что описанная процедура получения энергий и собственных функций локализованных состояний основана на правильном выборе порождающего вектора  $\mathbf{g}_0$ . Наиболее удачным оказывается использование в качестве

$\mathbf{g}_0$  вектора, входящего с максимальным весом в собственную функцию (6) искомого локализованного состояния. Применительно к задаче, решаемой в настоящей работе, естественную роль такого вектора играет состояние со спином примесного атома, антипараллельным направлением магнитного момента основной решетки.

#### 4. АФМ примесные состояния в энергетическом спектре системы

Используя вычислительный метод, описанный в предыдущем разделе, найдем характеристики локализованных примесных состояний в подпространстве одночастичных возбуждений системы (1). Для этого построим два первых ортонормированных базисных вектора в циклическом подпространстве оператора  $H - E_0$ , порожденном вектором  $\mathbf{g}_0$  (энергия  $E_0$  определяется выражением (3)):

$$\mathbf{g}_0 = S_{(0p0)}^- |0\rangle,$$

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_1 = & [5 - \delta_{p0} + \Theta(p - n)]^{-1/2} [S_{(0p1)}^- + S_{(0p-1)}^- + S_{(-1p0)}^- + \\ & + S_{(0p+10)}^- + (1 - \delta_{p0})S_{(0p-10)}^- + \Theta(p - n)S_{(1p0)}^-] |0\rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

где оператор  $S^- = S^x - iS^y$ .

С помощью векторов (9) получим три первых матричных элемента якобиевой матрицы (5):

$$\begin{aligned} a_0 = & -\frac{I}{2} \eta \alpha_{pn}, \quad b_0 = \frac{I}{2} \eta \sqrt{\alpha_{pn}}, \\ a_1 = & -\frac{I}{2} \left( \eta - 5 + \frac{\gamma_{pn}}{\alpha_{pn}} \right), \\ \alpha_{pn} = & 5 - \delta_{p0} + \Theta(p - n), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{pn} = & 4 + \delta_{p0}(1 + \delta_{n0}) + \delta_{p1} - \Theta(p - n + 1) - \\ & - 2\Theta(p - n - 1) - \Theta(p - 2n). \end{aligned} \quad (11)$$

По матричным элементам (10), (11), используя рекуррентные соотношения (7), построим полиномы  $P_l(\epsilon)$  до  $l = 2$  включительно. Наименьший корень уравнения  $P_2(\epsilon) = 0$  дает значение энергии примесного локального уровня, лежащего ниже энергии  $E_0$  и отвечающего основному состоянию системы (1):

$$\begin{aligned} \epsilon_{pn} = & -\frac{I}{4} \left\{ \eta(1 + \alpha_{pn}) - 5 + \frac{\gamma_{pn}}{\alpha_{pn}} + \right. \\ & \left. + \sqrt{[\eta(\alpha_{pn} - 1) + 5 - \gamma_{pn}/\alpha_{pn}]^2 + 4\eta^2 \alpha_{pn}} \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Собственная функция этого состояния определяется формулой (6) при подстановке в нее векторов (9) и энергии  $\epsilon = \epsilon_{pn}$ .

В каждой области значений параметра  $\eta \ll 1$  или  $\eta \gg 1$  энергии  $\epsilon_{pn}$  можно представить в удобном для исследования виде, разлагая выражение (12) по величине  $\eta$  или  $1/\eta$ :

$$\epsilon_{pn} \approx -\frac{I\eta}{2} \begin{cases} \alpha_{pn} \left( 1 + \frac{\eta}{5 - \gamma_{pn} \alpha_{pn}^{-1}} \right), & \eta \ll 1, \\ (1 + \alpha_{pn}) \left[ 1 - \frac{5 - \gamma_{pn} \alpha_{pn}^{-1}}{\eta(1 + \alpha_{pn})^2} \right], & \eta \gg 1. \end{cases} \quad (13)$$

Заметим, что главные члены разложения (13) будут минимальны при максимальном значении  $\alpha_{pn}$ , а следующие члены — при максимальной величине  $\gamma_{pn}$ . Для каждого фиксированного числа  $n$  оба эти условия выполняются одновременно в случае  $p = n + \delta_{n0}$  (см. формулы (11)). При этом примесный уровень имеет наименьшую энергию  $\epsilon_{n+\delta_{n0}, n}$ , определяемую выражением (13) с  $\alpha_{pn} = 6$  и  $\gamma_{pn} = 3 + \delta_{n1} - 2\delta_{n0}$ .

Из соотношений (11), (13) следует также, что наибольшей энергией  $\epsilon_{0n}$  обладает состояние, в котором дефект находится в плоскости поверхности ( $p = 0$ ,  $\alpha_{0n} = 4 + \delta_{n0}$ ,  $\gamma_{0n} = 5 - \delta_{n0} - \delta_{n1}$ ). Если примесь расположена в глубине кристалла ( $p \gg n$ ), то энергия локального уровня  $\epsilon_v$  ( $\alpha_{pn} = 6$ ,  $\gamma_{pn} = 0$ ) занимает некоторое промежуточное положение  $\epsilon_{n+\delta_{n0}, n} < \epsilon_v < \epsilon_{0n}$ . В полученных решениях (13) примесь перестает чувствовать поверхность уже при значениях  $p \geq 2(n + \delta_{n0})$ , в области которых выполняется равенство  $\epsilon_{pn} = \epsilon_v$ . Те же соотношения между энергиями примесных состояний получаются непосредственно из выражения (12) при любой рассматриваемой величине  $\eta$ .

Относительное расположение примесных уровней  $\epsilon_{0n}$ ,  $\epsilon_v$  и  $\epsilon_{n+\delta_{n0}, n}$  в энергетическом спектре системы (1) в зависимости от параметра  $\eta$  схематически изображено на рис. 2 (состояния с другими номерами  $p$  заключены между приведенными уровнями). Как видно на рис. 2 и из формул (12), (13), с изменением величины  $\eta$  все энергии  $\epsilon_{pn}$  ведут себя аналогичным образом: стремятся к

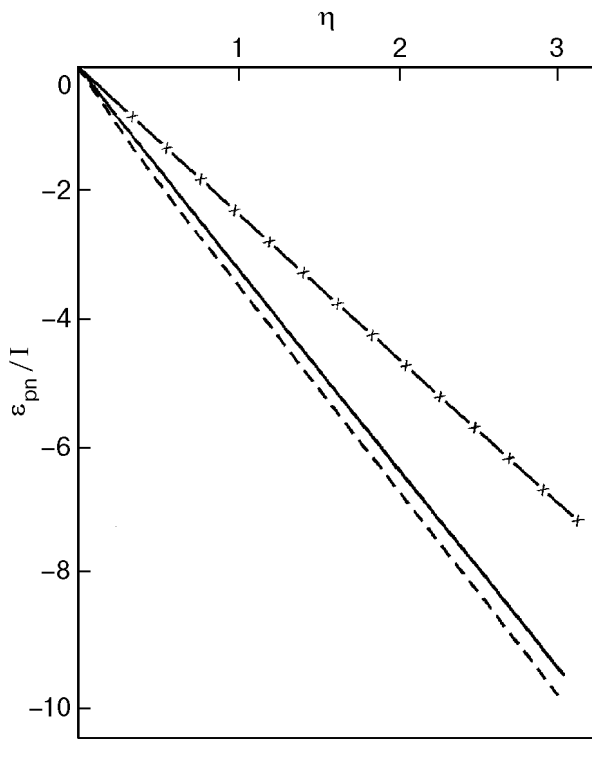


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния системы (1) от параметра  $\eta = -I'/I$  при расположении АФМ примеси в глубине кристалла ( $p \gg n$ ) (—), в плоскости поверхности ( $p = 0$ ) (—x—x—), в подповерхностном слое с номером  $p = n + \delta_{n0}$  (---).

нижней границе непрерывного спектра при  $\eta \rightarrow 0$  и отщепляются все дальше от нее при  $\eta \rightarrow \infty$ . Однако расстояние в спектре системы между уровнем  $\epsilon_v$  и разными приповерхностными уровнями имеет неодинаковую зависимость от параметра  $\eta$ . С помощью выражений (11), (13) трудно найти это расстояние в случае  $p = n + \delta_{n0}$ :

$$\epsilon_v - \epsilon_{n+\delta_{n0},n} = I \begin{cases} \frac{3}{5} \eta^2 \frac{3 + \delta_{n1} - 2\delta_{n0}}{27 - \delta_{n1} + 2\delta_{n0}}, & \eta \ll 1, \\ \frac{1}{84} (3 + \delta_{n1} - 2\delta_{n0}), & \eta \gg 1. \end{cases} \quad (14)$$

Из (14) видно, что при  $\eta \rightarrow \infty$  полученное расстояние стремится к определенной положительной величине, не зависящей от  $\eta$ . При этом уровни  $\epsilon_v$  и  $\epsilon_{n+\delta_{n0},n}$  на рис. 2 идут параллельно друг другу, сохраняя свое взаимное расположение при  $\eta \ll 1$ . В то же время, как следует из (11), (13), разность  $\epsilon_{0n} - \epsilon_v$  увеличивается с ростом  $\eta$  пропорционально величине этого параметра.

Поведение энергии  $\epsilon_v$  на рис. 2 полностью согласуется с результатами, полученными ранее в работах [6,7] для АФМ примеси в безграничном ферромагнетике. Однако относительное расположение уровней  $\epsilon_{0n}$  и  $\epsilon_v$  на этом рисунке в области  $\eta \leq 1$  принципиально отличается от аналогичных зависимостей, представленных в работе [9] для частного случая поверхности  $n = 0$ . По-видимому, это различие связано с недостаточно продуманным в работе [9] выбором начала отсчета энергий в спектре полуограниченной системы.

Влияние ориентации поверхности на АФМ примесные состояния в полуограниченном ферромагнетике особенно ясно прослеживается на рис. 3, где приведены численные зависимости энергий (12) от положения примеси в решетке при различных значениях числа  $n$ . На рис. 3 видно, что при каждой фиксированной величине  $n$  максимум и минимум энергии  $\epsilon_{pn}$  достигаются в тех же случаях  $p = 0$  и  $p = n + \delta_{n0}$ , что и в приближенных выражениях (13). С дальнейшим увеличением номера  $p$  энергии  $\epsilon_{pn}$  растут, стремясь к предельному значению  $\epsilon_v$  и совпадая с ним при  $p \geq 2(n + \delta_{n0})$ .

## 5. Обсуждение результатов

Полученные в разд. 4 результаты имеют простую физическую интерпретацию. Понятно, что состояние с перевернутым спином АФМ примеси (вектор  $\mathbf{g}_0$  в выражениях (9)) обладает наименьшей энергией при наличии у дефекта максимального возможного числа ближайших соседей. В свою очередь переверот спина атома в первой координационной сфере примеси (вектор  $\mathbf{g}_1$  в (9)) становится энергетически наиболее выгодным при расположении этого атома на поверхности системы. Поскольку собственная функция (6) локализованного примесного состояния содержит суперпозицию векторов  $\mathbf{g}_0$  и  $\mathbf{g}_1$ , то отвечающая ей энергия будет минимальной при одновременном выполнении обоих сформулированных выше условий. В рассматриваемой модели системы такая ситуация возможна для каждого заданного направления поверхности в единственном случае, реализующемся при помещении примеси в подповерхностный слой с номером  $p = n + \delta_{n0}$  (см. рис. 1). Таким образом, положение минимума энергий  $\epsilon_{pn}$ , изображенных на рис. 3, определяется геометрией полуограниченной магнитной решетки.

Относительная глубина обнаруженного минимума  $(\epsilon_v - \epsilon_{n+\delta_{n0},n})/|\epsilon_v|$  невелика (см. рис. 3 и выражения (13), (14)). Это объясняется тем, что состояние  $\mathbf{g}_1$ , обуславливающее его появление,

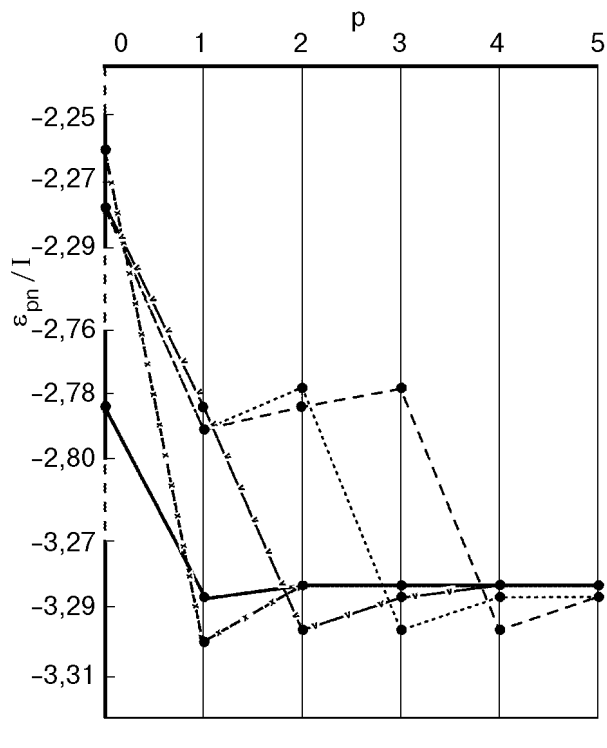


Рис. 3. Энергии АФМ примесных состояний в полуограниченном ферромагнетике при различных направлениях поверхностной плоскости ( $\eta = 1$ ):  $n = 0$  (—);  $1$  (—x—x—);  $2$  (—v—v—);  $3$  (.....);  $4$  (— — —).

входит в функцию (6) с меньшим весом, чем вектор  $\mathbf{g}_0$ , и вносит сравнительно меньший вклад в энергии локальных уровней. Следует ожидать, что при ослаблении ферромагнитного обмена в приповерхностной области системы глубина полученного минимума увеличится, так как перевороты спинов ближайших соседей примеси облегчаются в указанной области. В противоположном случае соотношение между энергиями  $\epsilon_{pn}$  может измениться, и при достаточно большой величине обмена в области поверхности энергетически наиболее выгодным станет положение примеси в глубине кристалла. Учет следующих координационных сфер дефекта дает пренебрежимо малый вклад в энергии  $\epsilon_{pn}$  и не меняет заметно их относительное расположение на рис. 2, 3.

Проведенный анализ легко обобщить на случай дробных значений  $n$ . Поскольку все особенности системы сосредоточены в плоскости  $(x, y)$ , достаточно рассмотреть только обозначенную двумерную ситуацию. Тогда расстояние от поверхности, определяемой соотношением  $m_y = cm_x$  ( $c = n_y/n_x \geq 1$  — несократимая дробь;  $n_x, n_y \geq 1$  — целые числа), до примеси, имеющей координаты  $m'_y \geq cm'_x$ , можно записать в виде

$$r = a(m'_y - cm'_x)(1 + c^2)^{-1/2}, \quad (15)$$

где  $a$  — постоянная решетки. Согласно приведенным выше физическим соображениям и в соответствии с геометрией системы, энергетически наиболее выгодное положение примеси достигается при  $m'_y = m_y$ ,  $m'_x = m_x - 1$  (см. также рис. 1). Как следует из (15), при этом примесь находится в слое, отстоящем от поверхности на величину  $r_{\min} = ac(1 + c^2)^{-1/2}$ . Расстояние между соседними слоями получается из выражения (15) при  $m'_y n_x - m'_x n_y = 1$  и равно  $r_0 = an_x^{-1}(1 + c^2)^{-1/2}$ . Отсюда номер слоя, соответствующего примесному уровню с минимальной энергией, определяется как  $p = r_{\min} / r_0 = n_y$  и совпадает при  $n_x = 1$ ,  $n_y = n$  с полученным в разд. 4 результатом для целочисленных значений  $c = n$ . Очевидно, что для поверхностей  $m_x = m_y / c$ , лежащих между плоскостями  $n = 0$  и  $n = 1$  на рис. 1, искомым номер будет иметь величину  $p = n_x$ .

Таким образом, энергия основного состояния полуограниченного ферромагнетика с АФМ примесью существенно зависит не только от обменных взаимодействий и положения дефекта относительно поверхности, но и от направления поверхностной плоскости в магнитном кристалле. Особый интерес представляет то обстоятельство, что при любых рассматриваемых значениях параметров в системе обнаруживается выделенный подповерхностный слой, расположение примеси в котором является энергетически наиболее выгодным. Расстояние этого слоя от поверхности оказывается неодинаковым для разных направлений поверхностной плоскости и полностью определяется ее ориентацией относительно кристаллографических осей решетки.

В заключение автор выражает благодарность Е. С. Сыркину за многочисленные обсуждения результатов работы.

1. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *Теория магнитоупорядоченных кристаллов с примесями*, Наука, Москва (1970).
2. Н. Ishii, J. Kanamori, and T. Nakamura, *Progr. Theor. Phys.* **33**, 795 (1965).
3. Ю. А. Изюмов, М. В. Медведев, *ЖЭТФ* **51**, 517 (1966).
4. Y. I. Wang and H. Callen, *Phys. Rev.* **160**, 358 (1967).
5. Б. Я. Балагуров, В. Г. Вакс, *ЖЭТФ* **66**, 1135 (1974).
6. V. I. Peresada, V. N. Afanasyev, and V. S. Borovikov, *Solid State Commun.* **17**, 867 (1975).
7. В. И. Пересада, В. Н. Афанасьев, В. С. Боровиков, *ФНТ* **4**, 111 (1978).
8. Т. Г. Петрова, *ФНТ* **4**, 1453 (1978).
9. В. С. Боровиков, *ФТТ* **23**, 2530 (1981).
10. В. И. Пересада, *ЖЭТФ* **53**, 605 (1967).
11. В. И. Пересада, *ФКС*, Харьков, ФТИНТ АН УССР, вып. 2, 172 (1968).

12. В. И. Пересада, Е. С. Сыркин, *ФТТ* **16**, 687 (1974).
13. В. И. Пересада, Е. С. Сыркин, *ФНТ* **3**, 229 (1977).
14. Т. Г. Петрова, *ФНТ* **6**, 627 (1980).
15. Т. Г. Петрова, Е. С. Сыркин, *Phys. Status Solidi* **B116**, 475 (1983).

**Antiferromagnetic impurity states in semiinfinite  
ferromagnet with different surface orientations  
about crystal axes**

**T. G. Petrova**

The spin states localized at an antiferromagnetic impurity placed on the surface of a semiinfinite Heisenberg ferromagnet or in one of its undersurface

layers are studied. Different cases of surface orientation about the crystal axes are considered. The energies and the eigenfunctions of the localized impurity states are obtained depending on the parameters of the problem. It is found that a definite undersurface layer with the most advantageous-in-energy impurity position always exists in the system considered. The distance of this layer from the surface is completely conditioned by the direction of the surface plane about the axes of the magnetic lattice.