

Mn 掺杂 GaN 电子结构和光学性质研究*

邢海英^{1)†} 范广涵^{1)‡} 赵德刚²⁾ 何 苗¹⁾ 章 勇¹⁾ 周天明¹⁾

1) 华南师范大学光电子材料与技术研究所, 广州 510631)

2) 中国科学院半导体研究所集成光电子学国家重点联合实验室, 北京 100083)

(2008 年 1 月 11 日收到, 2008 年 3 月 11 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法计算不同 Mn 浓度掺杂 GaN 晶体的电子结构和光学性质. 计算结果表明 Mn 掺杂 GaN 使得 Mn 3d 与 N 2p 轨道杂化, 产生自旋极化杂质带, 材料表现为半金属性, 非常适于自旋注入, 说明该种材料是实现自旋电子器件的理想材料, 折射率在带隙处出现峰值, 紫外区光吸收系数随 Mn 浓度的增加而增大.

关键词: Mn 掺杂 GaN, 第一性原理, 电子结构, 光学性质

PACC: 7110, 7115A, 7115M, 7865K

1. 引 言

稀磁半导体 (diluted magnetic semiconductor, DMS) 是指 II-IV 族或 III-V 族化合物半导体中由磁性过渡族金属离子或稀土金属离子部分替代非磁性阳离子所形成的一类新半导体材料. DMS 的主要应用领域是基于自旋极化输运或自旋注入半导体的新型自旋电子器件. 而自旋注入是实现半导体材料自旋电子器件的首要条件, 尤其是如何实现在室温下半导体材料中自旋注入是人们关注的问题. 例如, 制备偏振发光二极管 LED 就是要在室温下向量子阱中进行电子或空穴的自旋注入, 根据能级跃迁选择定则来实现偏振光发射的 LED. 理论计算预言的 Mn, Cr 或 V 掺杂 GaN 的居里温度 (T_C) 可能高于室温^[1-6]引起了人们的广泛关注. 由于 Mn^{2+} 离子的电子组态为 $3d^5$, 最外层电子为半满, 自旋量子数 $S = 5/2$, 其有效磁矩 (有效玻尔磁子数) $P_{\text{eff}} = 5.92\mu_B$. 所以在过渡族元素中, Mn^{2+} 离子的有效磁矩最大, 掺杂效应最明显, 此方面的理论和实验研究较多. 在理论方面, Katayama-Yoshida 等人^[7]采用基于密度泛函理论 (DFT) 研究 Mn 掺杂 GaN, 发现

$Ga_{1-x}Mn_xN$ ($x = 0.25$) 具有稳定的铁磁基态. Sato 和 Katayama-Yoshida^[8]采用基于 Korringa-Kohn-Rostoker 方法的相干近似理论计算研究 Mn 掺杂 GaN 表明: 低 Mn 浓度掺杂时具有稳定的自旋玻璃态, 高 Mn 浓度掺杂时具有稳定的铁磁态. 在实验方面, 已采用不同的实验方法证实 $(Ga, Mn)N$ 的 T_C 高于室温^[9-12], 包括 Mn 扩散^[9]、Mn 离子注入^[10]和外延生长 (金属有机化学气相沉积 (MOCVD)^[11]和分子束外延 (MBE)^[12]) 等方法. 此外, 有些研究小组还成功制备了高 Mn 浓度、 T_C 高于室温的 $(Ga, Mn)N$, 如文献 [13-15] 中制备的 Mn 浓度分别高达 6%—9% 和 5% (摩尔分数, 全文同), 且 X 射线测量表明 $(Ga, Mn)N$ 薄膜中未形成第二相.

目前, 对 $(Ga, Mn)N$ 的研究多数集中在磁学性质和合成技术方面. 对于实现 $(Ga, Mn)N$ 基光电器件, 除了磁学性质, 了解其结构、光学、电学性质也非常重要. 但至今对其光学性质的研究尚显不足. 本文采用基于 DFT 的平面波赝势法 (plane-wave pseudopotential, PWP) 对不同 Mn 掺杂的 GaN 晶体的结构、能带、电子态密度进行理论计算, 详细分析 Mn 掺杂后的能带结构和态密度, 以及不同 Mn 浓度对 $(Ga, Mn)N$ 光学性质的影响, 以便为实验研究提

* 国家自然科学基金 (批准号 50602018), 广东省自然科学基金 (批准号 D6025083), 广东省科技攻关计划 (批准号 2006A10802001), 广州市科技攻关重大项目 (批准号 2005Z12D0071) 和粤港关键领域重点突破项目 (批准号 207A010501008) 资助的课题.

† E-mail: hy.xing@yahoo.com.cn

‡ 通讯联系人. E-mail: gfan@senu.edu.cn

供理论指导.

2. 模型结构和计算方法

2.1. 模型构建

理想 GaN 多为六方纤锌矿结构,属于 $P63mc$ 空间群,对称性为 $C6v-4$,晶格参数 $a = b = 0.3189$ nm, $c = 0.5185$ nm,其中 c/a 为 1.626,比理想六角密堆积结构的 1.633 小, c 方向的 Ga—N 键长为 0.1969 nm,其他方向的键长为 0.1965 nm,其晶胞由 Ga 的六角密堆积和 N 的六角密堆积反向套构而成.文中的计算结构均基于超晶胞模型,依据不同 Mn 掺杂浓度 x ($x = 0.0625, 0.1250$) 分别选取 32 原子、16 原子超晶胞体系,每个超晶胞中掺杂一个 Mn 原子.文中以 32 原子体系为代表给出超晶胞结构,如图 1 所示.实验中 Zenneck 等人^[16]利用透射电子显微镜 (TEM) 分析表明 $96.5\% \pm 5.0\%$ 的 Mn 原子在 GaN 中主要是取代 Ga^{3+} 的晶格位置;Liu 等人^[17]利用 X 射线发射法 (PIXE) 对 (Ga, Mn)N 薄膜进行测量,也得到了类似的实验结果.此外, Gebicki 等人^[18]的电子顺磁共振 (EPR) 实验则证实了薄膜中存在 $Mn^{2+}(d^5)$ 离子构型.因此,本文超晶胞中选取 Mn 替代 Ga 的晶格位置进行计算.

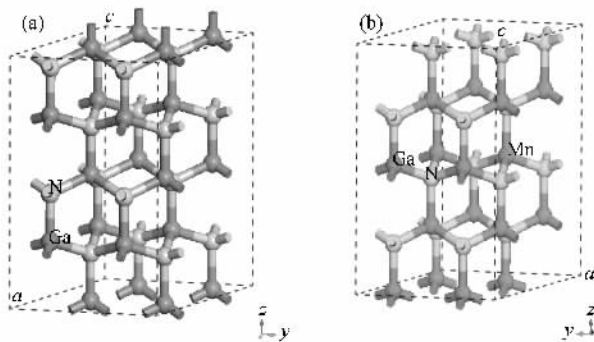


图 1 GaN 32 原子体系超晶胞结构图 (a) GaN 超晶胞结构图; (b) $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$ 超晶胞结构图

2.2. 计算方法

文中计算工作均基于 DFT 的从头算量子力学程序 CASTEP^[19]完成.计算中采用周期性边界条件,电子波函数通过平面波基矢组扩展,并采用超软赝势^[20]描述离子实与价电子间的相互作用,以尽量减少平面波基矢个数.选取 Ga, N, Mn 的价电子组态分

别为 $Ga 3d^{10} 4s^2 4p^1$, $N 2s^2 2p^3$, $Mn 3d^5 4s^2$, Mn 自旋态设定为向上.在倒易的 k 空间中,平面波截止能 $E_{cut} = 400$ eV,交换-关联能采用广义梯度近似 (GGA) 的 PBE 近似法^[21],体系总能量和电荷密度对布里渊区 (Brillouin 区) 的积分计算使用 Monkhorst-Pack^[22]方案,并对 32 和 16 原子超晶胞体系分别选择 k 网格点为 $4 \times 4 \times 2$ 和 $7 \times 4 \times 2$,以保证体系能量在准完备平面波基水平上的收敛,其自洽收敛精度为 2×10^{-6} eV/atom,原子间相互作用力收敛标准为 0.3 eV/nm,单原子能量的收敛标准为 1.0×10^{-5} eV/atom,晶体应力收敛标准为 0.05 GPa,原子的最大位移收敛标准为 0.0001 nm.为使计算结果稳定精确,计算中先优化晶胞结构,根据所得晶胞参数再优化内坐标,最后以此为基础计算电学和光学性质.

3. 计算结果与讨论

3.1. GaN 的电子结构

首先计算 GaN 电子结构以便于与其掺杂后进行比较.计算中先对 GaN 超原胞进行结构优化,所得晶格结构参数与实验值的比较如表 1 所示.由该数据可看出优化后 $c/a = 1.629$ 与实验值 1.626 符合很好,偏差仅为 0.18%,可以说明本文计算方法的可靠性.

表 1 优化后 GaN 晶格参数与实验值^[23]比较

晶格结构参数	实验值/nm	计算值/nm
a	0.3189	0.3203
c	0.5185	0.5217
c/a	1.626	1.629

图 2 和图 3 分别给出了 GaN 的相关态密度图,图 4 为 GaN 能带图.从图 2 和图 3 可以看出, GaN 的价带主要由两组能级组成,即由 $-16 \sim -11$ eV 的下价带和 $-7 \sim 0$ eV 的上价带组成.下价带主要来源于 Ga 3d, N 2s 及少量的 Ga 4s, Ga 4p 和 N 2p; 上价带主要来源于 N 2p, Ga 4s 和少量 Ga 4p 和 N 2s. GaN 的导带主要来源于 Ga 4s, Ga 4p, N 2s 及少量的 N 2p.图 4 为 GaN 的能带结构图.计算所得的带隙值 $E_g = 1.98$ eV, 较实验值 $E_g = 3.39$ eV 偏低.原因在于计算中采用的 DFT 理论是基态理论,而能隙属于激发态的性质,因此得到的结果偏低,这也是采用该理论计算时普遍存在的现象^[24-27],但这并不影响

对 GaN 电子结构的理论分析. 由图 4 可以看出 GaN 为直接禁带半导体, 导带底和价带顶位于 Brillouin 区的 G 点处, 计算结果与 Pugh 等人^[28]的工作一致.

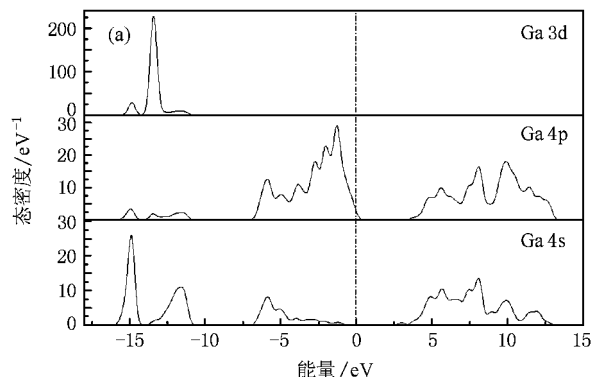


图 2 Ga 和 N 的分波态密度 (a) Ga (b) N

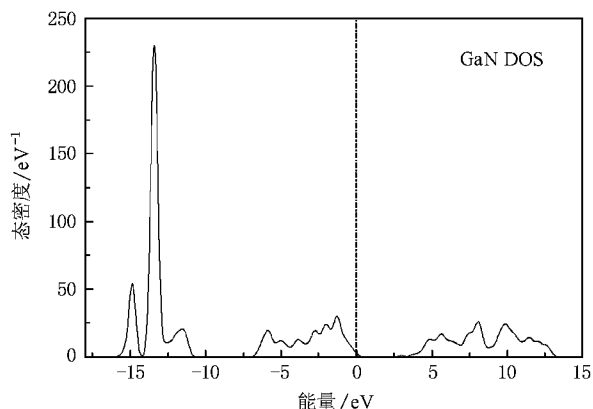


图 3 GaN 的总态密度

3.2. 掺杂计算的结果和讨论

本文计算表明 Mn 原子掺杂 GaN 使其电子结构发生明显变化, 且不同 Mn 浓度情况下其光学性质亦发生变化.

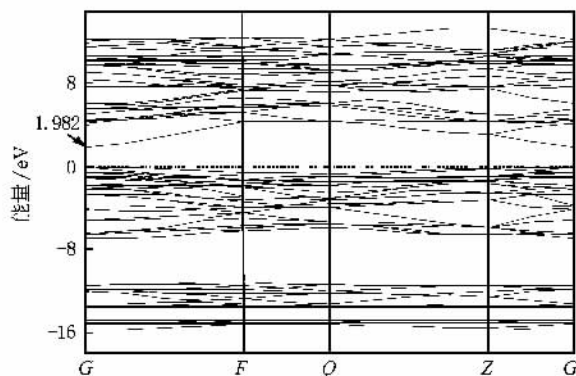


图 4 GaN 的能带结构

3.2.1. Mn 掺杂 GaN 电子结构

图 5 和图 6 分别为 $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ ($x = 0.0625, x = 0.1250$) 的能带结构图和态密度图. 如图 5 所示, 不同 Mn 浓度掺杂后能带结构仍为直接禁带半导体, 导带底和价带顶位于 Brillouin 区的 G 点处, 所得带隙相关值见表 2. 如表 2 所示, Mn 掺杂后的 E_g 较未掺杂时的 1.98 eV 有所增大, 这主要是由于加入了合金成分 Mn. 无掺杂的半导体没有磁性, 自旋向上与自旋向下的能带相同, 未产生能带(自旋)劈裂, 故没有磁性. 当 Mn 原子掺入后, 上下自旋产生分裂. 图 5(a) 中标记 t_{2p} 代表 N 离子的 p 能带, t_{2d} 与 e_d 代表 Mn 离子的 d 能带, 其中 t_{2p} 和 t_{2d} 两能带空间分布的对称性相同. 由于 N 的电负性较强, 所以 N 的 t_{2p} 能带处于远离费米能级 (E_F) 的深处, Mn 的 3d 能带处于相对较浅的能级中, 故 Mn 的 t_{2d} 、 e_d 能带位于 N 的 t_{2p} 之上. 另外由于 N 具有较小的原子尺寸, 使得具有相同对称性的 Mn t_{2d} 与 N t_{2p} 之间相互作用较强, 将位于 N t_{2p} 能带之上的 Mn t_{2d} 能带向上推, 将 N t_{2p} 能带向下推, 故使 E_g 值增大. 文中计算结果与文献^[29]相符合.

另如图 5(a)(c) 所示, Mn 原子掺入最显著的效应是能带图中出现与 Mn 有关的自旋极化杂质带, 杂质带宽分别为 0.5 eV、0.98 eV, 分别位于价带顶上方 1.02 eV、1.21 eV. 该结果与理论^[30]和实验^[31]相符合. E_F 贯穿于杂质带中, 材料表现为半金属性. 在自旋向上部分中含有自旋极化杂质带, 沿 Brillouin 区方向表现出弥散特性. 自旋向上占据费米面, 自旋向下未占据费米面, 明显表现为自旋注入, 即杂质带中通过有效质量传输产生 100% 的自

旋极化载荷子注入.此外, Mn 的掺入没有使价带显

著自旋极化,而使导带产生明显的自旋极化.

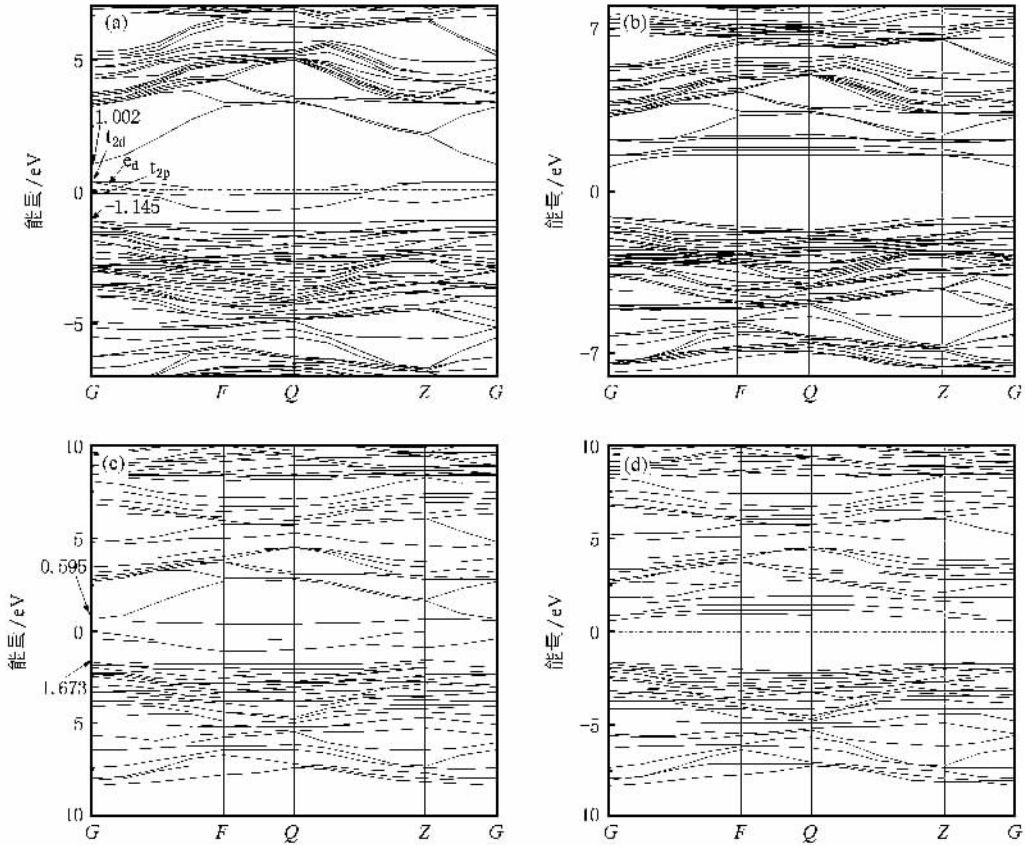


图 5 Mn 掺杂 GaN 的能带 (a) $x = 0.0625$ (自旋向上) (b) $x = 0.0625$ (自旋向下) (c) $x = 0.1250$ (自旋向上); (d) $x = 0.1250$ (自旋向下)

表 2 不同 Mn 浓度掺杂带隙相关值

Mn 浓度	E_g/eV	杂质带宽/eV	杂质带位置/eV
$x = 0.000$	1.98	—	—
$x = 0.0625$	2.15	0.50	$E_v + 1.02$
$x = 0.1250$	2.26	0.98	$E_v + 1.21$

图 6 为 $Ga_{1-x}Mn_xN$ ($x = 0.0625, 0.1250$) 的态密度图.如图所示, Mn 的掺入没有改变材料的半导体性质,而是引入了自旋极化杂质带,且费米能级位于其中.理想情况下,如果载荷子在其中具有足够的迁移率,那么从 $Ga_{1-x}Mn_xN$ 注入的载流子将产生 100% 的自旋极化.该自旋向上杂质带是由 Mn 3d 杂质带与 N 2p 轨道杂化而展宽的分离能带.图中的 t^b 态代表成键态,其来源于 Mn 3d (由 d_{xy}, d_{yz} 和 d_{zx} 轨道组成) 轨道和 Mn 原子最近邻的 4 个 N 原子的 2p 轨道杂化; t^a 态对应于反键态; e 态代表非成键态,其源于 Mn 3d γ 轨道 (由 $d_{x^2-y^2}$ 和 d_{z^2} 轨道组成).在导带底可以看到自旋向下的 Mn 3d 能级与 N 2p 发生

较弱的轨道杂化,在价带中 Mn 3d 态对自旋向上的贡献略大于对自旋向下的贡献,因此价带没有产生有效自旋极化.上述结果与能带图中观察到的现象一致.此外, $x = 0.1250$ 的自旋向上 Mn 3d 峰较 $x = 0.0625$ 时有所展宽,这主要源于 Mn 浓度较高时 Mn d 的波函数交叠,该计算结果与 Kim 的结果^[32]相符.

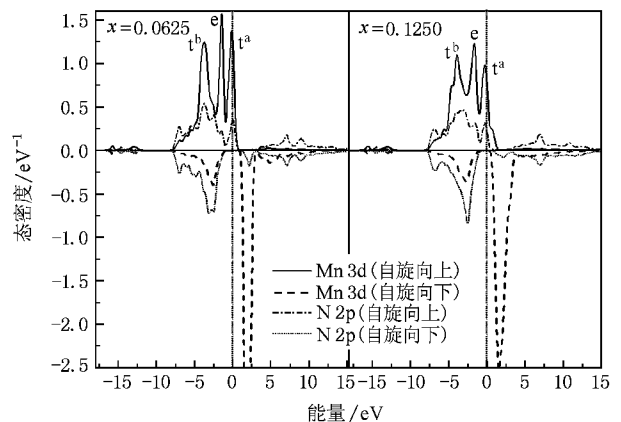


图 6 $Ga_{1-x}Mn_xN$ ($x = 0.0625, x = 0.1250$) 的态密度

3.2.2. Mn 掺杂 GaN 的光学性质

根据半导体光学性质,在线性响应范围内其宏观光学性质可以由复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 来描述,其中 $\epsilon_1 = n^2 - k^2$, $\epsilon_2 = 2nk$ (k 为消光系数). 根据直接跃迁定义和克喇末-克朗尼格(Kramers-Kronig)色散关系可推得晶体的介电函数实部、虚部、吸收系数、反射率等^[33]. 与本文计算有关的内容如下:

$$\epsilon_1 = 1 + \frac{8\pi^2 e^2}{m^2} \sum_{\mathbf{K}} \int_{\text{BZ}} d^3 \mathbf{K} \frac{2}{2\pi} \frac{|\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{\text{CV}}(\mathbf{K})|^2}{[E_{\text{C}}(\mathbf{K}) - E_{\text{V}}(\mathbf{K})]} \times \frac{\hbar^3}{[E_{\text{C}}(\mathbf{K}) - E_{\text{V}}(\mathbf{K})]^2 - \hbar^2 \omega^2}, \quad (1)$$

$$\epsilon_2 = \frac{4\pi^2}{m^2 \omega^2} \sum_{\mathbf{K}} \int_{\text{BZ}} d^3 \mathbf{K} \frac{2}{2\pi} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{\text{CV}}(\mathbf{K})|^2 \times \delta[E_{\text{C}}(\mathbf{K}) - E_{\text{V}}(\mathbf{K}) - \hbar\omega], \quad (2)$$

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}[(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} + \epsilon_1]^{\frac{1}{2}}}, \quad (3)$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}[(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2)^{\frac{1}{2}} - \epsilon_1]^{\frac{1}{2}}}, \quad (4)$$

$$K(\omega) = \sqrt{2}(\omega \sqrt{\epsilon_1(\omega)^2 - \epsilon_2(\omega)^2} - \epsilon_1(\omega))^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

式中 C, V 分别表示导带和价带, BZ 为第一布里渊区, \mathbf{K} 为倒格矢, $\hbar = h/2\pi$, $|\mathbf{e} \cdot \mathbf{M}_{\text{CV}}(\mathbf{K})|^2$ 为动量跃迁矩阵元, ω 为角频率, $E_{\text{C}}, E_{\text{V}}$ 分别为导带和价带上的本征能级. 以上公式是分析晶体能带结构和光学性质的主要理论基础,它反映了能级间电子跃迁所产生光谱的发光机理.

图 7 为不同 Mn 浓度掺杂 GaN 计算所得的超晶胞折射率和消光系数曲线. 从图 7 可以看出折射率与消光系数在 E_{g} 处出现峰值 (E_{g} 的理论值偏低,见表 2). 这可以由以下公式解释^[34]:

$$n(\omega) = 1 + \frac{c}{\pi} \int \frac{d\alpha(\omega')}{d\omega'} \log \left[\frac{\omega' + \omega}{\omega' - \omega} \right] d\omega', \quad (6)$$

式中 ω' 和 ω 为光子频率, c 为光速, $\alpha(\omega')$ 为频率 ω' 对应的吸收系数. 在低于带隙处, $\frac{d\alpha(\omega')}{d\omega'}$ 和折射率随能量增加而增大. 当能量接近带隙时, 吸收曲线斜率改变, 趋于平坦, 此时 $\frac{d\alpha(\omega')}{d\omega'}$ 值随能量的增加反而变小. 因此, 在带隙处折射率有个峰值. 在高于带隙后折射率随着能量增加又出现一个增大过程, 这主要与高阶跃迁有关. 该计算结果与 Antoine-Vincent 等人^[35]和 Kawashima 等人^[36]实验结果一致.

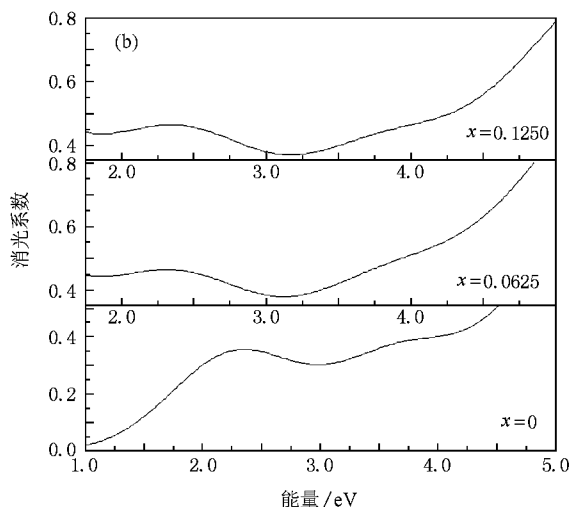
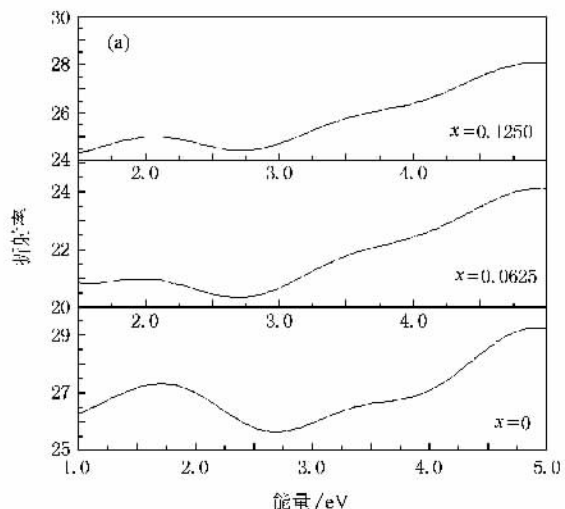


图 7 不同 Mn 浓度超晶胞的折射率和消光系数曲线

图 8 为光吸收系数谱, 如图 8 所示, 在紫外光区吸收能力随 Mn 浓度的增加而增大, 这与 Polyakov 等人^[37]的实验结果一致.

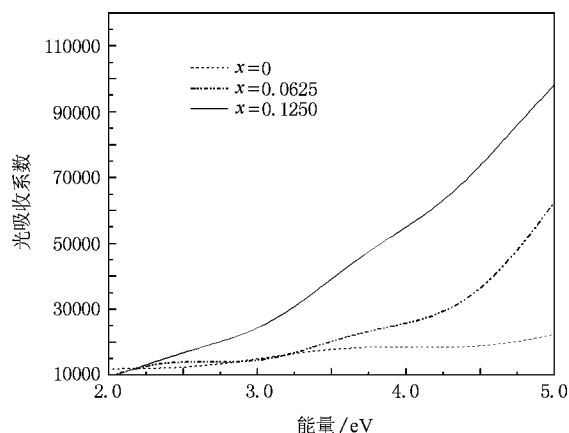


图 8 Mn 掺杂 GaN 光吸收系数谱

4. 结 论

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法计算了不同 Mn 浓度掺杂 GaN 的能带结构、电子态密度和光学性质,分析了掺杂后能带结构、电子态密度的变化.计算表明,Mn 掺杂后,由于

Mn 3d 与 N 2p 轨道杂化产生自旋极化杂质带,材料表现为半金属性,通过有效质量传输产生 100% 自旋极化载离子注入.这一特性和高于室温的 T_C ,使其成为实现自旋电子器件的理想材料,如结合现有 GaN 较为成熟的生长制备技术将具有广阔的应用前景.光学性质计算发现其折射率在 E_g 处出现峰值,且在紫外区光吸收系数随 Mn 浓度的增加而增大.

- [1] Dietl T, Ohno H, Matsukura F, Cibert J, Ferrand D 2000 *Science* **287** 1019
- [2] Dietl T, Ohno H, Matsukura F 2001 *Phys. Rev. B* **63** 195205
- [3] Crooker S A, Furis M, Lou X, Adelman C, Smith D L, Palmstrøm C J 2005 *Science* **309** 2191
- [4] Van Schilfgaarde M, Myrasov O N 2001 *Phys. Rev. B* **63** 2332052
- [5] Jungwirth T, Kêinig J, Sinova J 2002 *Phys. Rev. B* **66** 0124022
- [6] Sato K, Katayama-Yoshida H 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** L485
- [7] Katayama-Yoshida H, Kato R, Yamamoto T 2001 *J. Cryst. Growth* **231** 428
- [8] Sato K, Katayama-Yoshida H, 2002 *Semicond. Sci. Tech.* **17** 367
- [9] Reed M L, El-Masry N A, Stadelmaier H H 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3473
- [10] Theodoropoulou N, Hebard A F 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 3475
- [11] Thaler G T 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3964
- [12] Reed M J, Arkun F E 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 102504
- [13] Sonoda S, Shimizu S, Sasaki T 2002 *J. Cryst. Growth* **237-239** 1358
- [14] Sonoda S, Tanaka I 2006 *J. Phys. : Condens. Mat.* **18** 4615
- [15] Kocan M, Malindretos J 2006 *Semicond. Sci. Tech.* **21** 1348
- [16] Zenneck J, Niermann T 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 063504
- [17] Liu C, Alves E, Ramos A R 2002 *Nucl. Instrum. Meth. B* **191** 544
- [18] Gebicki W, Adamowicz L, Strzeszewski J 2001 *Mater. Sci. Eng. B* **82** 182
- [19] Segall M D, Lindan P, Probet M J 2002 *J. Phys. : Condens. Matter.* **14** 2717
- [20] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [21] Perdew J, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [22] Monkhorst H J, Pack D J 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [23] Liang C G, Zhang J 1999 *Chinese Journal of Semiconductors* **20** 2 (in Chinese) 梁春广、张 冀 1999 半导体学报 **20** 2]
- [24] Pickett W E 1989 *Comput. Phys. Rep.* **9** 115
- [25] Ding S F, Fan G H, Li S T, Xiao B 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4062 (in Chinese) 丁少峰、范广涵、李述体、肖 冰 2007 物理学报 **56** 4062]
- [26] Shen Y B, Zhou X, Xu M, Ding Y C, Duan M Y, Linghu R F, Zhu W J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3440 (in Chinese) 沈益斌、周 勋、徐 明、丁迎春、段满益、令狐荣锋、祝文军 2007 物理学报 **56** 3440]
- [27] Chen K, Fan G H, Zhang Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1054 (in Chinese) 陈 琨、范广涵、章 勇 2008 物理学报 **57** 1054]
- [28] Pugh S K, Dugdale D J, Brand S, Abram R A 1999 *Semicond. Sci. Techn.* **14** 23
- [29] Shi H W, Gong X G 2005 *Phys. Rev. B* **71** 144409
- [30] Van Schilfgaarde M, Myrasov O N 2000 *Phys. Rev. B* **63** 233205
- [31] Korotkov R Y, Gregie J M, Wessels B W 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 1731
- [32] Kim J J, Makino H 2003 *Mat. Sci. Semicon. Proc.* **6** 503
- [33] Shen X C 1992 *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* (Beijing : Science Press) p76 (in Chinese) 沈学础 1992 半导体光谱和光学性质 (北京 科学出版社) 第 76 页]
- [34] Jiang L F, Shen W Z, Ogawa H, Guo Q X 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 5704
- [35] Antoine-Vincent N, Natali F 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 5222
- [36] Kawashima T, Yoshikawa H 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3528
- [37] Polyakov A Y, Govorkov A V 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 9

Electronic structure and optical properties of GaN with Mn-doping^{*}

Xing Hai-Ying^{1)†} Fan Guang-Han^{1)‡} Zhao De-Gang²⁾ He Miao¹⁾ Zhang Yong¹⁾ Zhou Tian-Ming¹⁾

¹⁾ *Institute of Optoelectronic Material and Technology, South China Normal University, Guangzhou 501631, China*

²⁾ *State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*

(Received 11 January 2008 ; revised manuscript received 11 March 2008)

Abstract

Calculations of the electronic structure and the density of states of GaN with Mn are carried out by means of first-principles plane-wave pseudopotential method based on density functional theory. The results reveal a 100% spin polarized impurity band in band structure of $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ due to hybridization of Mn 3d and N 2p orbitals. The material is half metallic and suited for spin injectors. In addition, a peak of refractive index can be observed near the energy gap. The absorption coefficient increases in the UV region with the increase of the Mn content.

Keywords : $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$, first-principles, electronic structure, optical properties

PACC : 7110, 7115A, 7115M, 7865K

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50602018), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. 06025083), the Research Program of Science and Technology of Guangdong Province, China (Grant No. 2006A10802001), the Key Program of Science and Technology Research of Guangzhou, Guangdong Province, China (Grant No. 2005Z12D0071), and the Crucial Field and Key Breakthrough Project of Guangdong Province and Hongkong, China (Grant No. 207A010501008).

[†] E-mail : hy.xing@yahoo.com.cn

[‡] Corresponding author. E-mail : gfan@sclu.edu.cn