

ZnO_{1-x}C_x 稀磁半导体的磁特性的 第一性原理和蒙特卡罗研究^{*}

陈 珊 吴青云 陈志高 许桂贵 黄志高[†]

(福建师范大学物理系,福州 350007)

(2008 年 8 月 13 日收到,2008 年 9 月 15 日收到修改稿)

利用第一性原理计算得到 C 掺杂 ZnO 的电子结构,发现系统具有半金属的电子结构.从态密度的分析可以看到 Zn-3d 和 C-2p 电子具有强烈的杂化作用,这是体系具有相对稳定铁磁基态的原因.利用第一性原理得到的磁性耦合强度并结合蒙特卡罗模拟得到了 C 掺杂浓度为 5.55%、8.33%、12.5% 的 ZnO_{1-x}C_x 分别具有 210 K、260 K、690 K 的居里温度.同时,详细地分析了 C 掺杂引起的电子转移和 C、Zn、O 的 s、p 和 d 电子的自旋向上和自旋向下电子数的变化.通过比较研究,发现 ZnO_{1-x}C_x 的局域磁矩主要来源于 Zn-3d 电子和 C-2p 电子之间的相互作用,而局域磁矩耦合倾向于 RKKY 耦合.

关键词: ZnO_{1-x}C_x, 磁性, 第一性原理, 蒙特卡罗模拟

PACC: 7550P, 7115A, 7115Q, 7540M

1. 引 言

由于稀磁半导体(DMS)具有半导体性和磁性的双重性质,且有望在自旋电子器件中发挥重要的作用而引起人们的广泛关注.特别是,寻找高居里温度的 DMS 材料成为关注的焦点. Dietl 等人^[1]采用 Zener 模型对各种稀磁半导体材料的计算结果预言了宽带半导体 GaN 和 ZnO 可能具有室温以上的居里温度,这一结果激发了国际高温稀磁半导体的研究潮流. ZnO 是目前受关注的氧化物半导体材料,它具有宽带隙(3.3 eV)较高的激子束缚能(60 meV 左右),能够实现室温紫外发光,而且原料廉价、无毒性.因此, ZnO 基材料成为稀磁半导体研究的热点^[2,3].

从理论上, Sato 等人基于第一性原理计算预测了空穴载流子掺杂的 Zn_{1-x}Mn_xO 稀磁半导体具有室温铁磁性^[4]. 人们利用磁性过渡金属原子如 V、Cr、Mn、Fe、Co 和 Ni 等来掺杂 ZnO 发现不需任何载流子掺杂就具有室温铁磁性^[5]. 最近,我们通过第一性原理和蒙特卡罗模拟相结合计算出三种浓度(5.55%,

8.33%, 12.5%) Co 掺杂 ZnO, 发现该体系具有稳定的铁磁基态, 居里转变温度为 220 K、360 K、530 K^[6]. 然而, 从实验的观点来看, 由于掺入磁性原子, 使得这个铁磁性的来源变得有些难以解释. 因为这些掺入原子本身就具有内在磁性, 如果它们在受主半导体中以团簇或其他第二相存在的话, 则可能成为铁磁性的来源. 为了避免这一磁性原子团的来源问题, 使用非磁性原子掺杂来研究稀磁半导体的磁性是一种好的想法. 最近, 实验和理论计算结果都表明, Cu 掺杂的 ZnCuO 具有稳定的室温铁磁性^[7,8]. 另外, C 基材料的铁磁性引起了人们广泛关注^[9-16], 一般认为它们的磁性来源于内在的 C 缺陷. 自然地, 人们把目光转向 C 掺杂的稀磁半导体. 新近, 我们基于第一性原理和蒙特卡罗模拟, 通过计算发现 C 掺杂 CdS 具有半金属性和磁性, 其居里温度估计可达 270 K^[14]. 特别是, Feng 小组制备了掺 C 的 ZnO 薄膜, 测量结果表明其居里温度可能高于 400 K^[16]. 上述非磁性原子掺杂结果表明, 稀磁半导体形成的铁磁性来源排除了磁性原子团的贡献, 其可能来源于非磁性原子 Cu、C 和 Zn、O 或 Cd、S 之间的耦合. 然而, 稀磁半导体中铁磁性的耦合

^{*} 国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 20005CB623605)、国家自然科学基金(批准号: 60876069)和国家光电子晶体材料工程技术研究中心开放基金(批准号: 2005DC105003)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zghuang@fjnu.edu.cn

机理至今仍然不是很清楚,是近程的交换、超交换耦合,还是远程的 RKKY 耦合?利用第一性原理计算并结合 Monte Carlo 模拟能实现对稀磁半导体的微观交换耦合和宏观统计磁性的预测,可能成为一种研究铁磁性耦合机理的行之有效的办法^[6,14].本文利用第一性原理计算了 $\text{ZnO}_{1-x}\text{C}_x$ ($x = 5.55\%, 8.33\%, 12.5\%$) 7 种不同组态下的磁交换相互作用能和电子结构,利用非磁性原子随机分布的 Heisenberg 哈密顿量的蒙特卡洛模拟计算了居里温度.特别详细地分析了 C 掺杂引起的电子转移和 C、Zn、O 的 s、p 和 d 电子的自旋向上和自旋向下电子数的变化.通过比较研究,发现 $\text{ZnO}_{1-x}\text{C}_x$ 中的磁性更倾向起源于远程的 RKKY 耦合.

2. 计算与模拟

2.1. 第一性原理计算

利用基于密度泛函理论的第一性原理来计算

$\text{ZnO}_{1-x}\text{C}_x$ 的电子结构和磁交换相互作用.采用以投影缀加波函数^[17]来表示价电子和芯态电子相互作用的 VASP 程序包 (Vienna ab initio simulation package)^[18,19]来计算.采用 Perdew 和 Wang 参数化的广义梯度近似 (GGA) 来描述交换关联势^[20],并用平面波来展开电子波函数,截断能为 520 eV.采用 $4 \times 4 \times 2$, $3 \times 4 \times 2$ 和 $3 \times 3 \times 2$ 的 Gamma 中心的 k 点网格来对 $2 \times 2 \times 2$, $3 \times 2 \times 2$ 和 $3 \times 3 \times 2$ 的 ZnO 超晶格的简约 Brillouin 区进行积分取样.这些参数设置保证了 1 meV 的总能收敛精度.

ZnO 是六角纤锌矿结构,计算中我们采用 ZnO 原胞的晶格常数的实验值 ($a = b = 3.249 \text{ \AA}$, $c = 5.205 \text{ \AA}$).以此原胞为基础,建立 $2 \times 2 \times 2$, $3 \times 2 \times 2$ 和 $3 \times 3 \times 2$ 的 ZnO 超晶格,并用两个 C 取代两个 O 原子从而得到三种不同浓度 ($x = 12.5\%, 8.33\%, 5.55\%$) 的 $\text{ZnO}_{1-x}\text{C}_x$.图 1 给出了在包含有 36 个 Zn 和 36 个 O 原子的 $3 \times 3 \times 2$ 的 ZnO 超晶格.为了后面研究电子转移问题的方便,分别标出了超原胞中 72 个原子在空间的排列序号.为了研究体系中的磁交

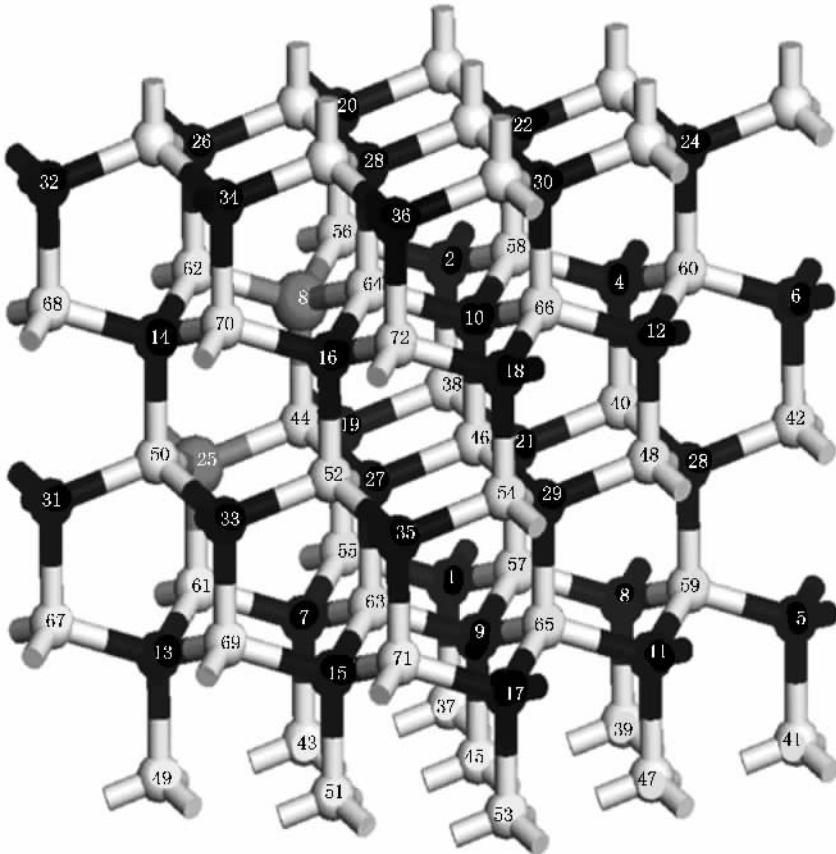


图 1 包含 36 个 Zn 原子 (白色) 和 36 个 O 原子 (黑色) 的 $3 \times 3 \times 2$ 纤锌矿结构的 ZnO 超晶格,用两个 C 原子 (灰色) 代替图中两个 O 原子的位置,一个取代第 8 位,另一个取代 i 位 ($i = 25, 14, 33, 7, 35, 18, 9$),组成 7 种不同的组态

换相互作用,用两个 C 原子取代在图中做了标号的 O 原子的位置,得到 7 种不同的组态,分别对应(8, 25)(8,14)(8,33)(8,7)(8,35)(8,18)和(8,9)组态,简称为组态 1,2,3,4,5,6 和 7.由于 2×2×2 超晶格比较小,考虑到平移对称性,组态 5 和组态 6 分别等价于组态 1 和组态 2.

2.2. Monte Carlo 模拟

在模拟中,考虑 L×L×L(L=16,20,32)纤锌矿结构,并利用周期边界条件.该结构由非磁性 C 原子、Zn 原子和 O 原子组成,C 原子以 x 的比例无规地替代 O 原子位置,O 原子的比例则为 1-x.系统的哈密顿量描述为^[6,14]

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - K \sum_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{u}_i)^2 - H \sum_i S_i^z, \quad (1)$$

其中 J_{ij}是交换作用常数,如图 1 所示,每个 C 原子周围都有相邻的 C 原子,设其中第 i 个 C 原子为 8 位置,则与其第 j 个近邻的交换作用常数可表示为 J_{ij} = J_{0j}(j = 25,14,33,7,35,18,9).对每个 C 原子, $\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}$ 的求和限于上述 7 个近邻之内;K 表示单轴各向异性常数, \mathbf{u}_i 是沿磁各向异性的易轴方向的单位矢量.H 是沿 z 方向的外磁场.有关 Monte Carlo 模拟部分的细节内容可以参照我们以前的相关工作^[21-24].系统的磁化强度和磁化率分别由以下两式计算:

$$m(T) = \sqrt{(\sum_i S_i^x)^2 + (\sum_i S_i^y)^2 + (\sum_i S_i^z)^2} / N, \quad (2)$$

$$\chi = N(m^2 - m^2) / T. \quad (3)$$

这里的 N 是稀磁半导体中 C 原子数.为了得到居里温度,同时计算了 U_L:

$$U_L = 1 - m^4 / 3 m^2, \quad (4)$$

使用 χ-T 和 U_L-T 曲线就可以估算居里温度^[25,26].在模拟中令 K=0, H=0.00086 eV.

3. 结果与讨论

图 2 给出了 ZnO_{0.9445}C_{0.0555}(3×3×2 超晶格)(x=5.55%)的总态密度(DOS),Zn-3d 和 C-2p 投影态密度(PDOS).图中,虚线对应费米面位置,即 E_F=0 处.从图中可见,费米面附近的传导电子几乎是 100% 自旋极化的,展现出明显的半金属行为.通过比较总态密度和 Zn-3d 和 C-2p 的分波态密度,可以

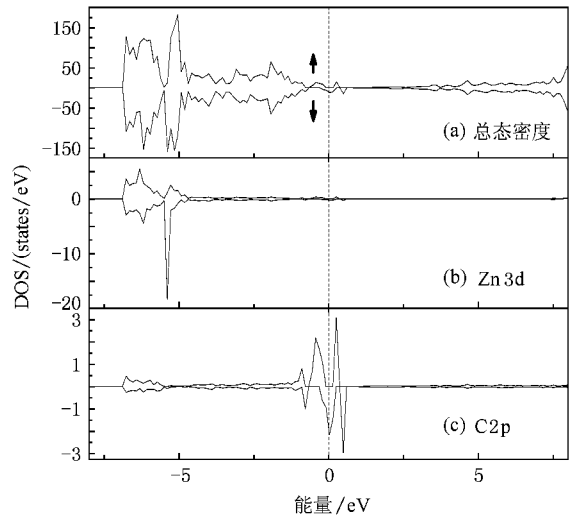


图 2 ZnO_{0.9445}C_{0.0555}(3×3×2 超晶格)的(a)总态密度(DOS), (b)Zn-3d 和(c)C-2p 投影态密度(PDOS).费米面设为零

发现大部分的自旋极化态源于 C-2p 电子的.对于 x = 12.5%, 8.33% 两种情况,发现具有与 x = 5.55% 情况类似的态密度.计算结果表明,ZnO_{1-x}C_x 超晶格在这几种掺杂浓度下都大致有 4.0μ_B 的总磁矩.利用第一性原理计算了图 1 中 7 种组态在铁磁和反铁磁自旋组合情况下的总能 E_{FM} 和 E_{AFM}.每对 C 原子的磁相互作用强度 J 由 J = E_{AFM} - E_{FM} 来确定^[6,14].如果 J 值是负的,表明反铁磁组态更稳定;反之,如果 J 是正的,则说明铁磁态更稳定.图 3 给出了 ZnO_{1-x}C_x(x = 5.55%, 8.33%, 12.5%)七种组态下磁交换作用常数 J.从图中我们可以得到除了低浓度下的组态 1 外,其他都具有铁磁基态.这些参数将作为后续 Monte Carlo 模拟的输入参数.从图 3 中 x = 5.55% 情况可以看出,组态 1 对应于两个掺

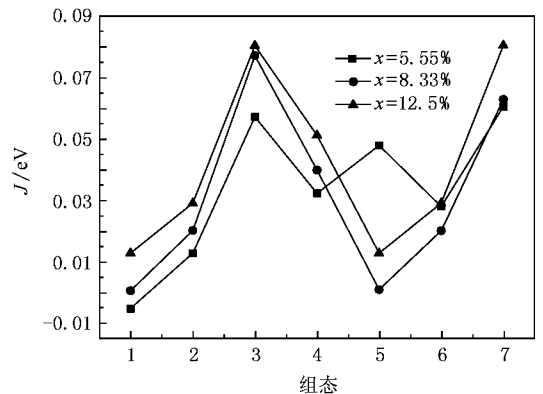


图 3 ZnO_{1-x}C_x(x = 12.5%, 8.33%, 5.55%)中两个 C 原子分别处于 7 种组态下得到的磁相互作用强度 J

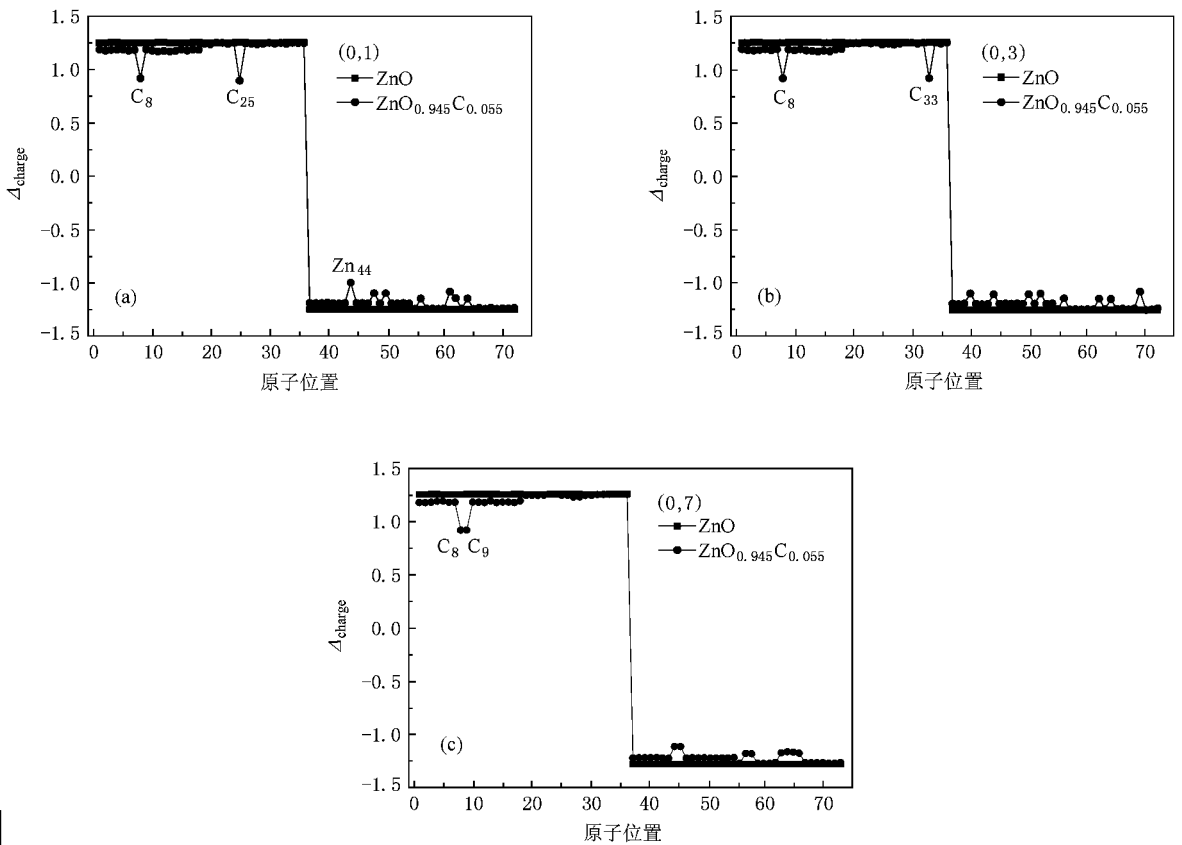


图 4 三种组态下两个 C 离子掺杂引起的 C, Zn 和 O 离子之间的电子转移 (a) 组态 1 (b) 组态 3 (c) 组态 7. 作为比较, 图中同时给出了纯 ZnO 中 Zn 和 O 离子之间的电子转移

入的 C 原子之间距离最近的情况, 系统呈现出反铁磁基态, 而组态 7 是两个 C 原子之间距离最远的情况, 系统呈现出稳定的铁磁基态, 而组态 3 对应的两个 C 原子之间的距离介于上述二者之间, 系统也呈

现出稳定的铁磁基态. 组态 1, 3 和 7 分别代表了两个 C 原子之间最小距离、中等距离和最大距离的组态, 具有典型性. 下面以这三个态为例, 重点研究 C 原子掺杂引起的 C, Zn 和 O 离子之间的电子转移.

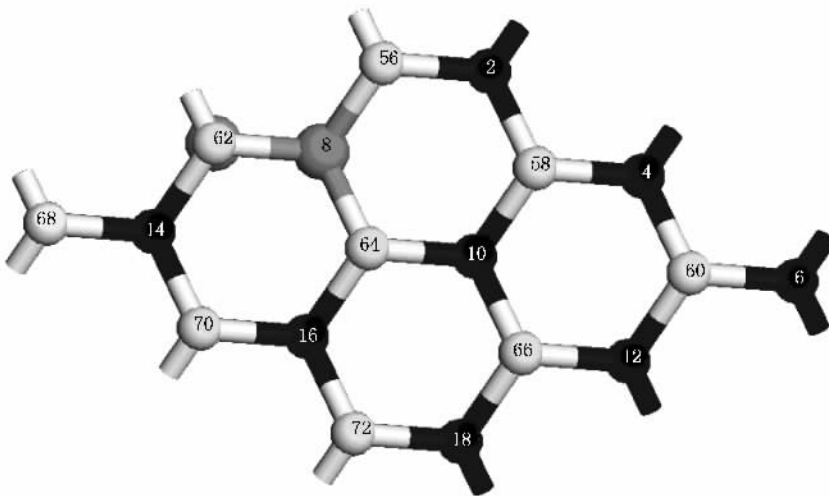


图 5 包含 α (灰色) 原子层的原子排列结构图 (其中 Zn (白色), α (黑色) 编号如图)

图 4(a)(b)(c)分别给出了组态 1,3,7 下两个 C 离子掺杂引起的 C, Zn 和 O 离子之间的电子转移. 作为比较, 图中同时给出了纯 ZnO 中 Zn 和 O 离子之间的电子转移. 从图中可以看到, 对于纯 ZnO, 不同位置的同一原子得失电子数变化很小. O 原子得到大约 1.25 个电子, Zn 原子失去大约 1.25 个电子. C 掺杂后, 尽管 C 原子和 O 原子仍然得到电子, 而 Zn 原子失去电子, 但是, O 原子得到的电子数比原来的少, Zn 原子失去电子数也比原来的少. 即, 当两个 C 取代两个 O 之后, 电荷进行了重新分配, Zn 失去的电子数减少. 特别值的注意的有两点, 之一, 与 C 相邻的 Zn 原子失去的电子数明显减少, 这体现了 C 原子磁矩的局域化的特点; 之二, C 的掺入同样使远程的 Zn 原子失去的电子数发生起伏的减少, 这意味 C 原子之间的磁性耦合应该是一种远程的 RKKY 耦合.

为了进一步研究上述两个问题, 这里以其中一个 C 原子为研究对象, 研究它周围原子中电荷转移情况. 图 5 给出了包含 C₈ 原子层的原子排列结构图. 表 1 给出了与图 5 对应的 C₈ 原子层面中 C₈ 与各个原子之间的距离, 以及 C 掺杂引起的电荷转移量的变化. 从表 1 可以看到, 掺杂 C 后电子不仅仅只转移到与 C 相邻的 Zn 原子上, 并且与 C 相距较远的 O, Zn 上也有电子的转移. 说明在此体系中电子的转移不是局域转移, 存在巡游电子. 因此, ZnO_{1-x}C_x 中 C 与 C 之间的耦合倾向于 RKKY 耦合. 即, 局域电子与传导电子之间的交换作用使传导电子发生自旋极化. 为了进一步研究磁性来源, 分别计算了 Zn 原子的 3d 和 4s, O 原子的 2s 和 2p 以及 C 原子的 2s 和 2p 轨道上自旋向上和自旋向下电子数差. 计算结果表明, Zn 原子在 3d 轨道上电子数差值较大, C 原子在 2p 轨道上电子数差值较大, 而 O 原子是在 2s 轨道上电子数差值较大. 图 6 给出了典型的 ZnO_{0.9445}C_{0.0555} 中组态 1, 3 和 7 与 C₈ 在同一层的 Zn 原子在 3d 轨道上、C 原子在 2p 轨道上、O 原子在 2s 轨道上自旋向上与自旋向下的电子数差. 从图中可以看到, 掺杂 C 原子的位置不同, 体系显现出磁

性强弱也不同. C 原子 2p 轨道上自旋向上与自旋向下电子数相差最大, 形成较大磁矩. 比较这三幅图, 发现磁性最强的组态 3 中, C 的 2p 轨道磁矩最大,

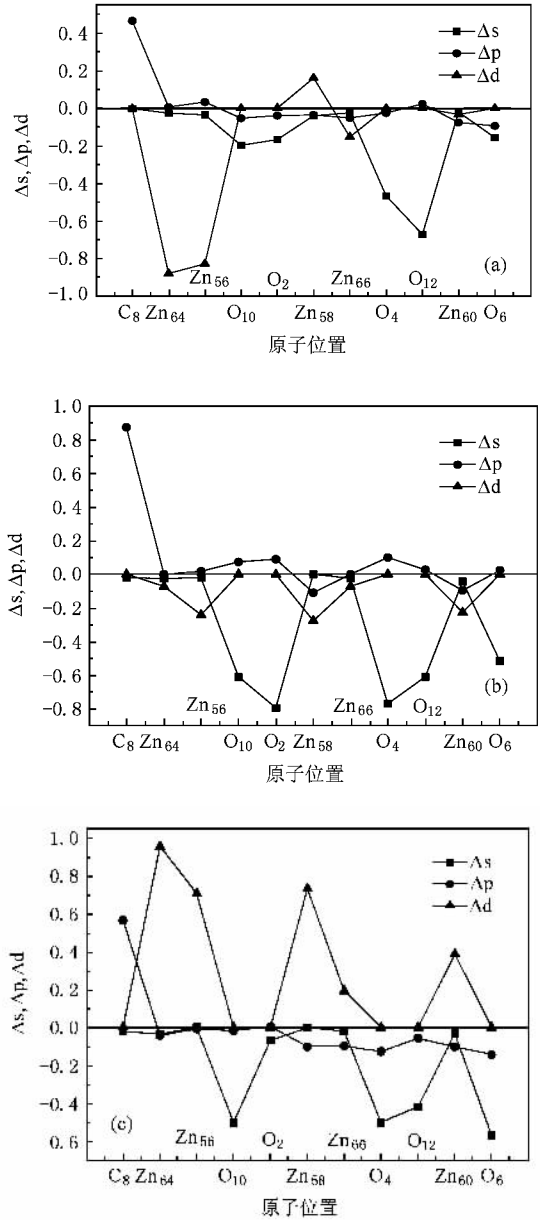


图 6 三种组态下 s, p, d 态电子自旋向上与自旋向下电子数差 (a) 组态 1 (b) 组态 3 (c) 组态 7

表 1 与图 5 所示对应的 C₈ 原子层面中 C₈ 与各个原子之间的距离, 以及 C 掺杂引起的电荷转移量的变化

	Zn ₅₆	Zn ₆₄	O ₁₀	O ₂	O ₆	O ₁₂	Zn ₅₈	Zn ₆₀	Zn ₆₆	O ₄
C ₈ 与近邻原子距离/Å	1.973(最近邻)		3.249(第二近邻)				3.801		5.001 5.628	
电荷转移量的变化(组态 1)	0.1005	0.0995	-0.0747	-0.0739	-0.0717	-0.0799	0.0062	0.0082	0.0142	-0.0677
电荷转移量的变化(组态 3)	0.1082	0.1017	-0.0743	-0.0717	-0.0718	-0.0786	0.006	0.0079	0.0135	-0.0727
电荷转移量的变化(组态 7)	0.0975	0.1087	-0.0738	-0.0766	-0.0727	-0.0651	0.0069	0.0071	0.0154	-0.0683

约 $0.8\mu_B$. 物质的磁性与其 3d 轨道有着密切的关系, 3d 轨道中未成对电子数的多少影响着磁学性质, Zn 原子 3d 电子自旋向上和自旋向下数目明显不同, 形成自发磁矩, 3d 电子是自旋极化的. 与 C 相邻的每个 Zn 原子都有比较大的磁矩, 而离 C 较远的 Zn 原子也具有一定的磁矩. 说明巡游电子在磁相互作用中起了重要的作用. 结合图 2 可以看出, 费米面附近的 DOS 几乎都是 C-2p 电子贡献的, 这与图 6 中所体现的 C 的 2p 轨道磁矩最大相一致. 因此系统的铁磁稳定性是费密面附近 Zn-3d 和 C-2p 的态密度叠加的结果, 即 Zn-3d 和 C-2p 电子的杂化所引起的. 综上所述, $ZnO_{1-x}C_x$ 的局域磁矩主要来源于 Zn-3d 电子和 C-2p 电子之间的相互作用, 而局域磁矩耦合倾向于 RKKY 耦合.

利用方程(1)和图 2 给出的不同组态的磁相互作用强度 J , 通过 Monte Carlo 模拟可以得到 $ZnO_{1-x}C_x$ ($x = 12.5\%, 8.33\%, 5.55\%$) 稀磁半导体的磁特性. 图 7(a) 和 (b) 给出了 $ZnO_{1-x}C_x$ ($x = 12.5\%, 8.33\%, 5.55\%$) 稀磁半导体的磁化强度和磁化率随温度变化的关系. 从图中可以看出铁磁性磁化率曲线和与居里温度相关的尖锐磁化率峰, 从中得到 $ZnO_{1-x}C_x$ ($x = 12.5\%, 8.33\%, 5.55\%$) 对应的居里温度分别为 690 K, 260 K, 210 K. 这与 Pan^[16] 实验得出的 C 掺杂 ZnO 具有室温以上的居里温度基本一致.

4. 结 论

本文利用第一性原理计算结合 Monte Carlo 模拟研究了 $ZnO_{1-x}C_x$ ($x = 5.55\%, 8.33\%, 12.5\%$) 的电子结构和磁特性. 计算结果表明: 1) 系统具有半金属的电子结构; 2) 系统有稳定的铁磁基态的原因是

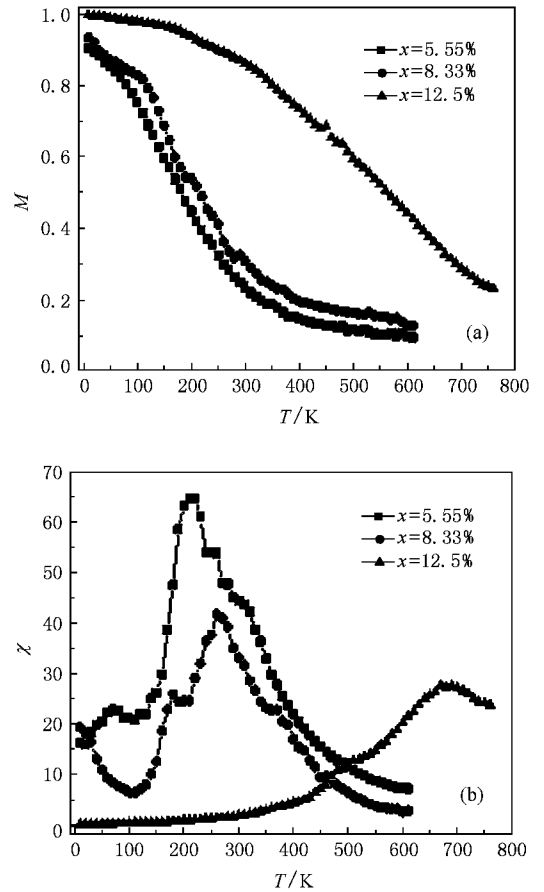


图 7 $ZnO_{1-x}C_x$ ($x = 12.5\%, 8.33\%, 5.55\%$) 稀磁半导体的磁化强度 (a) 和磁化率 (b) 随温度变化的关系

来源于 Zn-3d 和 C-2p 电子之间强烈的杂化作用; 3) 模拟得到 $ZnO_{1-x}C_x$ ($x = 5.55\%, 8.33\%, 12.5\%$) 稀磁半导体的居里转变温度分别为 210 K, 290 K, 690 K; 4) 掺杂 C 后电子不仅仅只转移到与 C 相邻的 Zn 原子上, 并且与 C 相距较远的 O, Zn 上也有电子的转移. 说明在此体系中电子的转移不是局域转移, 存在巡游电子, 局域磁矩耦合倾向于 RKKY 耦合.

[1] Dietl T, Ohno H, Matsukura F, Cibert J, Ferrand D 2000 *Science* **287** 1019
 [2] Özgür Ü, Alivov Ya I, Liu C, Teke A, Reshchikov M A, Dogan S, Avrutin V, Cho S J, Morkoc H 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 041301
 [3] Janisch R, Gopall P, Spaldin N A 2005 *J. Phys.: Condens. Matter* **27** R657
 [4] Sato K, Katayama-Yoshida H 2000 *Jpn. J. Appl. Phys.* **39** L555
 [5] Sluiter H F, Kawazoe Y, Parmanand Sharma, Raju A R, Rout C, Waghmare U V 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 187204
 [6] Wu Q Y, Chen Z G, Wu R, Xu G G, Huang Z G, Zhang F M, Du Y W 2007 *Solid State Communications* **142** 242

[7] Ye L H, Freeman A J, Delley B 2006 *Phys. Rev. B* **73** 033203
 [8] Buchholz D B, Chang R P H, Song J H, Ketterson J B 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 082504
 [9] Kopelevich Y, da Silva R R, Torres J H S, Penicaud A 2003 *Phys. Rev. B* **68** 092408
 [10] Rode A V, Gamaly E G, Christy A G, Fitz Gerald J G, Hydel S T, Elliman R G, Luther-Davies B, Veinger A I, Androulakis J, Giapintzakis J 2004 *Phys. Rev. B* **70** 054407
 [11] Esquinazi P, Spemann D, Höhne R, Setzer A, Han K H, Butz T 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 227201
 [12] Talapatra S, Ganesan P G, Kim T, Vajtai R, Huang M, Shima M,

- Ramanath I G , Srivastava D , Deevi S C , Ajayan P M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 097201
- [13] Ohldag H , Tyliczszak T , Höhne R , Spemann D , Esquinazi P , Ungureanu M , Butz T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 187204
- [14] Pan H , Feng Y P , Wu Q Y , Huang Z G , Lin J 2008 *Phys. Rev. B* **77** 125211
- [15] Wu R Q , Liu L , Peng G W , Feng Y P 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 122510
- [16] Pan H , Yi J B , Shen L , Wu R Q , Yang J H , Lin J Y , Feng Y P , Ding J , Van L H , Yin J H 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 127201
- [17] Brühl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [18] Kresse G , Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [19] Kresse G , Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [20] Perdew J P , Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [21] Feng Q , Huang Z G , Du Y W 2005 *Solid State Comm.* **134** 195
- [22] Huang Z G , Chen Z G , Peng K , Wang D H , Zhang F M , Zhang W Y , Du Y W 2004 *Phys. Rev. B* **69** 094420
- [23] Huang Z G , Chen Z G , Jiang L Q , Ye Q Y , Wu Q Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 1602
- [24] Weng Z Z , Feng Q , Huang Z G , Du Y W 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3177 (in Chinese) [翁臻臻、冯 倩、黄志高、都有为 2004 物理学报 **53** 3177]
- [25] Fukushima T , Sato K , Katayama-Yoshida H , Dederichs P H 2004 *Jpn. J. Appl. Phys.* **43** L1416
- [26] Schliemann J , König J , MacDonald A H 2001 *Phys. Rev. B* **64** 165201-1

Ferromagnetism of C doped ZnO : first-principles calculation and Monte Carlo simulation *

Chen Shan Wu Qing-Yun Chen Zhi-Gao Xu Gui-Gui Huang Zhi-Gao[†]

(Department of Physics , Fujian Normal University , Fuzhou 350007 , China)

(Received 13 August 2008 ; revised manuscript received 15 September 2008)

Abstract

In this work , the electronic structure and the stability of ferromagnetism of C-doped ZnO are studied by first-principles calculations and Monte Carlo simulation. The calculated results indicate that the ferromagnetic ground state is stabilized by its half-metallic electronic structure which originates from the strong hybridization between Zn-3d and C-2p electrons. Meanwhile , by using the coupling strength obtained from first-principles calculations and Monte Carlo method , the Curie temperatures of ZnO_{1-x}C_x ($x = 5.55\%$, 8.33% and 12.5%) are predicted to be 210 , 260 and 690 K , respectively , which is generally consistent with theoretical and experimental results. The electronic transfer resulting from C doping , and the changes between spin-up and spin-down electron changes for s , p and d electrons of C , Zn , O atom are analyzed in detail. The simulated results show that , the local magnetic moments of ZnO_{1-x}C_x originate mainly from the hybridization interaction between Zn-3d and C-2p electrons , while the magnetic coupling between the local magnetic moments is preferentially the RKKY coupling.

Keywords : ZnO_{1-x}C_x , magnetic properties , first-principles calculation , Monte Carlo

PACC : 7550P , 7115A , 7115Q , 7540M

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 20005CB623605) , the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60876069) and Fund of National Engineering Research Center for Optoelectronic Crystalline Materials (Grant No. 2005DC105003).

[†] E-mail : zghuang@fjnu.edu.cn