

Zn_{1-x}Mn_xO 纳米薄膜磁有序性的 Monte Carlo 模拟*

高茜 娄晓燕 祁阳[†] 单文光

(东北大学理学院, 沈阳 110004)

(2009年12月31日收到; 2010年6月21日收到修改稿)

基于 Zn_{1-x}Mn_xO 纳米薄膜磁性研究的实验结果及相关理论, 建立了一个包含多种交换作用的 Ising 多层膜模型, 采用 Monte Carlo 模拟的 Metropolis 算法对于其铁磁序的成因进行了模拟研究. 结果表明, Mn 掺杂浓度 (x) 越低越有利于铁磁序的形成, 但是 x 越低, 系统的磁化强度越小, 居里温度越低. 载流子对铁磁序的形成所起的调节作用随着 x 的增大而增强, 又随着磁各向异性常数 (K) 的增大而弱化. 本研究预测了 K 的增大有利于铁磁序的形成, 并能提高居里温度.

关键词: 稀磁半导体 (DMS), Zn_{1-x}Mn_xO 纳米薄膜, Ising 多层膜, Monte Carlo 模拟

PACS: 64.60.De, 72.25.Hg, 75.30.Hx, 75.50.Pp

1. 引言

近年来, 由于稀磁半导体材料 (DMSs) 具备了常规材料无法媲美的优异特性, 而备受瞩目^[1-13]. 尤其是受到 Dietl 等人预测^[3]的鼓舞, 各种方法制备的 ZnO 基 DMSs 屡见报道^[1,2,4-7,12,13]. 然而, 有研究表明一些实验的重复率很低^[1]; 有些相同样品的磁性行为截然相反^[5-7]. 这表明影响 DMSs 的磁性的参数还不能被有效地控制. 其根本原因在于 DMSs 中铁磁序的起源尚不清楚. 有研究者认为 DMSs 中铁磁性起源于磁性粒子团簇或磁性离子分离相^[1,8,9], 也有研究者认为该铁磁性是磁性离子替位式掺入基质材料的本征属性^[10-12].

为了研究 Zn_{1-x}Mn_xO 材料中铁磁序的成因, 已有一些相关的研究. 如于宙等人用共沉淀方法制备了 Mn 的名义掺杂量 (x) 分别为 0.1%, 0.5%, 0.7% 和 1.0% 的样品, 发现 $x \leq 0.7%$ 的样品具有室温铁磁性, 且 $x = 0.7%$ 的样品具有最大剩磁^[13]. 本研究小组采用溶胶-凝胶法在玻璃衬底上制备了 x 分别为 1.0%, 2.0%, 3.0%, 5.0%, 7.0%, 9.0%, 11.0% 和 13.0% 等 36 种薄膜样品, 并利用 Rigaku 的 X 射线衍射仪 (XRD, Cu-K α) 和 Riken 的振动样品磁强计 (BHV55 型) 对样品的微结构及其磁性进行了检测, 结果表明 x 为 1.0%, 2.0% 和

3.0% 的样品实现了替位式掺杂, 并表现出室温顺磁性, 其中 x 为 1.0% 的样品的磁化曲线斜率最大; 而 x 大于 3% 的样品则出现了不同程度的杂质相, 无论在室温下还是液氮温度下均未被检测出磁性. 据此可以推断, Zn_{1-x}Mn_xO 薄膜中铁磁序并非起源于 Mn 团簇或 Mn 的氧化物. 这与 Mn 金属的磁性表现以及 Anderson 和 Zener 对超交换作用的分析^[14,15]相符合. 因而, Zn_{1-x}Mn_xO 中的铁磁性应是其本征属性.

尽管如此, 鉴于目前检测手段的精确程度和完善性, 我们仍然不能确定适用于 Zn_{1-x}Mn_xO 的理论是双交换作用 (double-exchange) 模型、束缚磁极化子 (BMP) 模型, 还是 RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) 交换作用模型. 它们都有实验的支撑^[16-18], 而彼此又存在矛盾^[19-21]. 为了系统地研究 Mn 掺杂浓度、极化载流子浓度以及其他束缚极化电荷对于 Zn_{1-x}Mn_xO 薄膜中磁有序性的影响, 基于对实验结果的理论分析和 Ising 模型在研究相变问题方面所具有的优势^[22,23], 本文建立了一个包含多种交换作用和磁各向异性作用的稀疏 Ising 多层膜模型. 该模型的优点在于既考虑了 DMSs 中的自旋分布的随机性, 又利用了 Ising 模型的简单性及有效性. 然后, 采用能够有效处理此类问题的 Monte Carlo 方法^[23-25]对其进行模拟研究.

* 辽宁省科技计划项目 (批准号: 200822208) 和沈阳市科技计划项目 (批准号: 1091139-9-00, 60573065) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: qiyang@imp.neu.edu.cn

2. 模拟模型与方法

根据洪德(Hund)法则, Mn 的 5 个 3d 电子均不配对且自旋取向相同时能量最低, 因此, 每个 Mn^{2+} 对磁性贡献的自旋为 5/2. 又因 d-d 间的直接交换作用和氧诱导的间接交换作用均为反铁磁性, 故 $Zn_{1-x}Mn_xO$ 中铁磁序极有可能来自于极化载流子或其他束缚极化电荷的诱导. 设 S_i 为纤锌矿结构 $Zn_{1-x}Mn_xO$ (六方晶体点阵) 中第 i 个格点上离子的自旋, 与之发生交换作用的除了其他格点上的自旋 S_j , 还有赝自旋 s_i . 我们引入这个赝自旋来表示在 S_i 的 p-d 杂化轨道上极化载流子的自旋. 对于 $ZnO:Mn$ 体系而言, 这些极化载流子是弱局域化的空穴^[3], 而其他束缚极化电荷对铁磁序的诱导作用我们可将其归入磁晶各向异性中加以考虑, 因为这些束缚极化电荷是晶格中束缚杂质或缺陷的附属品, 它与晶格结构密切相关. 因此, 在外磁场中系统的哈密顿量 (Hamiltonian) 包含三部分, 即

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad (1)$$

式中 H_1 为交换作用能; H_2 为各向异性能; H_3 为外磁场作用能. 其中 H_1 为三项之和:

$$H_1 = - \sum_{\langle i,j \rangle} (\alpha_{ij} S_i \cdot S_j + \beta_{ij} S_i \cdot s_i + \gamma_{ij} s_i \cdot s_j), \quad (2)$$

式中 $\langle i,j \rangle$ 表示求和是遍及整个点阵空间的, i, j 表示格点的位置. 第一项为反铁磁交换作用能, 包含了 Heisenberg 直接交换作用能和氧诱导的超交换作用能, 对于没有 Mn 团簇的样品, Heisenberg 直接交换作用能为零, 则 α_{ij} 为以氧为媒介的 d-d 之间的超交换作用的交换积分; 第二项为铁磁交换作用能, β_{ij} 为 3d 电子与赝自旋耦合的交换积分; 第三项为反铁磁交换作用能, γ_{ij} 是赝自旋之间的交换积分.

根据 XRD 分析结果, 替位式掺杂的 $Zn_{1-x}Mn_xO$ ($x \leq 3\%$) 薄膜是 c 轴择优生长的纤锌矿结构, 具有单轴磁各向异性, 所以为了降低问题的复杂性, 假设外磁场沿 z (c) 轴方向, 而系统中所有的自旋都平行或反平行于易磁化轴 z 方向 (尽管有人认为 z 轴有可能不是易磁化轴^[4], 但是, 这对于模拟结果的影响不大). 于是 (1) 式中的后两项分别可表示为

$$H_2 = -K \sum_i (S_i \cdot u_z)^2 = -K \sum_i S_i^2, \quad (3)$$

$$H_3 = -\mu_B g \mathbf{h} \cdot \sum_i S_i = -\mu_B g h \sum_i S_i, \quad (4)$$

式中 K 为系统的磁各向异性常数, u_z 为晶场易磁化

轴 z 方向的单位矢量; μ_B 是玻尔磁子, g 是朗德因子, \mathbf{h} 为作用在 z 方向的外部磁场强度.

假设有 2 个 Mn 原子随机替位式掺入一个模拟原胞, 模拟原胞的点阵 (以图 1 中浅色小球所代表的阳离子所在位置为格点位置) 尺寸分别为 $20 \times 10 \times 4 = 800$, $10 \times 10 \times 4 = 400$, $10 \times 5 \times 4 = 200$, $5 \times 5 \times 4 = 100$ 和 $2 \times 5 \times 4 = 40$. 这样就得到了实际掺杂浓度 x 分别为 0.25%, 0.50%, 1.0%, 2.0% 和 5.0% 的 5 个多层膜样品. 根据实验测量结果, 纤锌矿型 $Zn_{1-x}Mn_xO$ 的晶格常数为 $a = b = 0.3249$ nm; $c = 0.5205$ nm, 则一个晶胞的体积为 5.4944×10^{-2} nm³. 所以, Mn 实际掺杂浓度分别为 4.55×10^{19} cm⁻³, 9.10×10^{19} cm⁻³, 1.82×10^{20} cm⁻³, 3.64×10^{20} cm⁻³ 和 9.10×10^{20} cm⁻³.

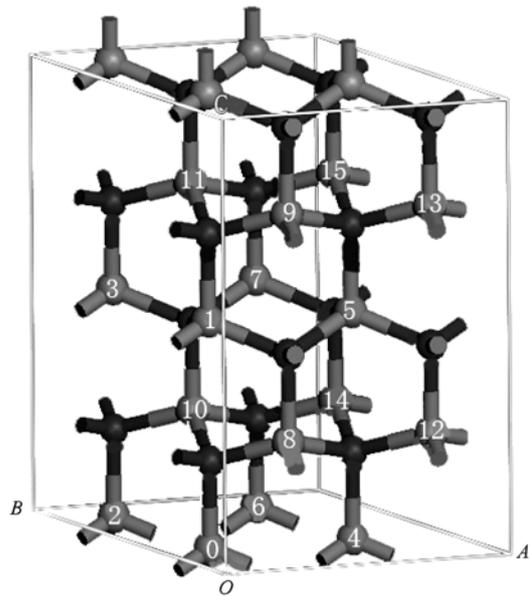


图 1 纤锌矿 ZnO 晶体的原子排列示意图 (深色小球代表氧原子, 浅色小球代表锌原子)

下面讨论 (2) 式中各个系数的确定. 在图 1 中, 先假设一个 Mn 原子固定于“1”点, 当另一个 Mn 原子位于“3”, “5”或“7”点时, 则两 Mn 原子在同一个 [001] 面内且与同一个 O 原子键合, 这时两个 Mn 原子的间距最近, 设之为 r_0 , 若它们之间的交换积分为 J_0 . 那么, 当两个 Mn 原子间距为 r_{ij} 时, 他们之间的交换积分 J_{ij} 随着 r_{ij} 的增加呈指数衰减^[26,27], 即有

$$J_{ij} \propto J_0 (r_{ij}/r_0)^{-n}. \quad (5)$$

由于本文将 RKKY 模型中交换积分的铁磁、反铁磁震荡性^[27,28] 做了分开处理, 又考虑到交换作用的本质是静电性的, 所以 (5) 式中的 n 应取 1. 令 J_0

$= -J, p_{ij}$ 为 2 个 Mn 原子分别位于 i 和 j 格点的概率, 则有

$$\alpha_{ij} = -p_{ij}J(r_0/r_{ij}). \quad (6)$$

与之类似, 设 Q_{ij} 为赝自旋 s_i 在第 i 个格点的 p-d 杂化轨道上出现的概率, 则

$$\beta_{ij} = \eta Q_{ij} p_{ij} J(r_0/r_{ij}), \quad (7)$$

这里 η 为局域化极化空穴诱导的铁磁交换积分相对强度系数, Q_{ij} 是这些空穴与 Mn 掺杂量的相对浓度 (n_h) 和迁移率 (μ) 的函数. 根据参考文献[29], 非故意掺杂的 ZnO 是 n 型半导体, 所以低浓度的 Mn 取代 Zn 获得的 $Zn_{1-x}Mn_xO$ 也是 n 型的, 其空穴浓度很低. 为了满足模拟的需要, 假设在不影响基质基本结构的条件下, 有额外的空穴注入 (如 N, H 的注入). 而注入空穴所引入的缺陷和基质本身的缺陷合并到磁晶各向异性中考虑. 当 n_h 增大时, Q_{ij} 会增大. 因为 s_i 在第 i 个格点的 p-d 杂化轨道上出现的机会增多; 根据莫特模型^[30], μ 增大, 意味着载流子域化部分缩小, 所以 Q_{ij} 会随着 μ 的增大变小. μ 受到杂质浓度和温度的影响^[31], 定量写出表达式十分困难. 这里把杂质浓度的影响也归入磁晶各向异性中考虑, 只考虑温度的影响. 如果把模拟的温度区间分为低、中、高温区, 那么在低温区, T 的影响不大; 中、高温区, 恰是以晶格散射为主的温区, 有 $\mu \propto T^{-3/2}$, 这样可以半经验地给出 $Q_{ij} = n_h / (1 + T^{-3/2})$.

γ_{ij} 的值不需要具体确定, 按照 Zener 的分析该项对系统熵的贡献可以忽略^[15], 故在对哈密顿量作约化处理时, 可将其移到等号的左边. 这样约化后的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H' &= (H + \sum_{\langle i,j \rangle} \gamma_{ij} s_i \cdot s_j) / J \\ &= \sum_i S_i \left[\sum_j p_{ij} \frac{r_0}{r_{ij}} \left(S_j - \frac{\eta n_h s_i}{1 + T^{-3/2}} \right) \right. \\ &\quad \left. - (K/J) S_i - \mu_B g h / J \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

在外磁场 $h \rightarrow 0$ 前提下, 分别对所有样品在各个参数取不同值的条件下进行模拟. 在模拟过程中, 遇到 Mn^{2+} 时, S_i 取 $\pm 5/2$, 否则 S_i 取 0; 每个极化空穴的自旋 s_i 取值为 ± 1 . 依照单自旋反转动力学原理, 采用 Monte Carlo 模拟中的 Metropolis 算法进行统计计算, 设每一步都满足细致平衡条件, 遇到边界时应用周期性边界条件进行处理. 每一个点取 15000 个 Monte Carlo 步 (MCS), 并舍弃前面的 9000MCS, 使系统达到平衡, 然后对后 6000 MCS 进行平均. 则格点的平均磁化强度和磁化率如下:

$$M = \frac{g\mu_B}{N} \sum_i \langle S_i \rangle, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{1}{N} (\langle \sum_i S_i \cdot \sum_i S_i \rangle \\ &\quad - \langle \sum_i S_i \rangle \cdot \langle \sum_i S_i \rangle), \end{aligned} \quad (10)$$

这里 N 为模拟原胞中总的格点数, k_B 是玻尔兹曼常数, T 是热力学温度. 磁化率 χ 最大值对应的温度就是居里温度 (T_C).

3. 结果与讨论

由于 η 取 5 时的模拟结果与实验结果和参考文献[3]相符合, 所以下列结果都在 η 取 5 条件下获得. 图 2(a) 和(b) 分别是 x 为 0.25% 的样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 和磁化率 $\chi / [(g\mu_B)^2 / J]$ 与 $k_B T / J$ 的关系曲线. 我们可以看到 x 为 0.25% 的样品在 n 和 K 都很小的条件下就具有自发铁磁性, 而且 n 对 T_C 几乎没有影响, 但是 K 的增加却使 T_C 有明显的提高.

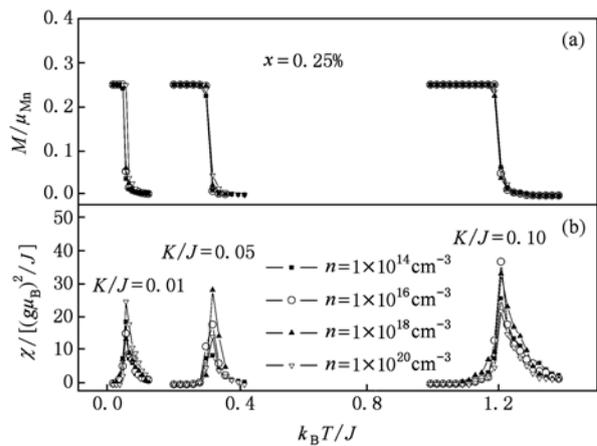


图 2 (a) x 为 0.25% 的样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 与 $k_B T/J$ 关系曲线; (b) x 为 0.25% 的样品的磁化率 $\chi / [(g\mu_B)^2 / J]$ 与 $k_B T/J$ 关系曲线

当掺杂浓度 x 增加到 0.50% 时, 如果 K/J 取 0.01, 无论 n 取值多大, 样品都没有铁磁性; 当 K/J 取 0.05, n 取 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时, 样品才具有铁磁性, 如图 3. 从图 3 中还可以发现, 当 K/J 取 0.05 时 n 的增加可以使 T_C 有一定的提高. 但是, 当 K/J 取 0.10 时, n 的值一旦超过阈值 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, 它对 T_C 的影响就弱化了.

然而, 随着 x 的增加, n 对 T_C 的影响又明显起来, 如图 4 所示. 对于 x 为 1.0% 的样品, K/J 取 0.05 时, 需要在 n 不小于 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 的条件下, 样

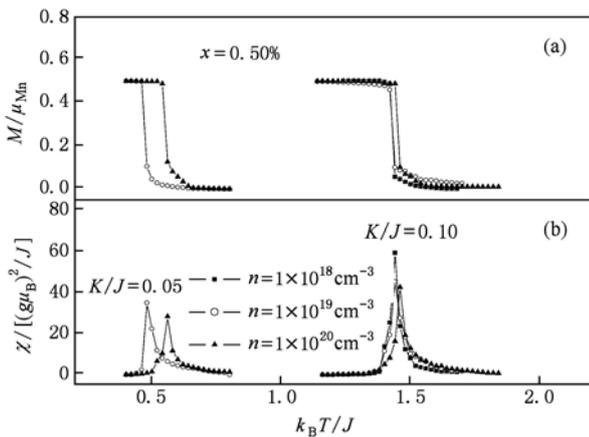


图3 (a) x 为 0.50% 的样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 与 $k_B T/J$ 关系曲线; (b) x 为 0.50% 的样品的磁化率 $\chi/[(g\mu_B)^2/J]$ 与 $k_B T/J$ 关系曲线

品才具有铁磁性. 即使 K/J 提高到 0.10 时, n 也需要高达 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 样品才具有铁磁性.

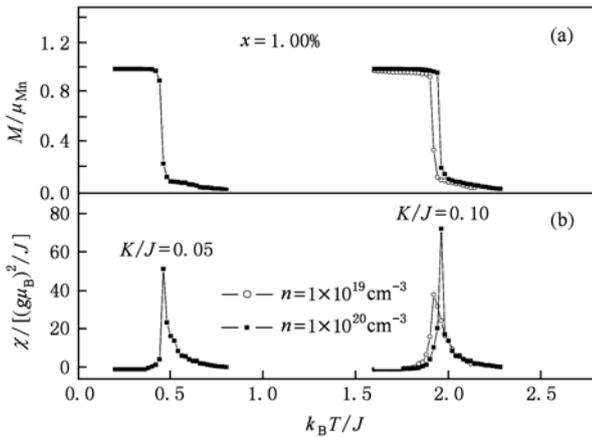


图4 (a) x 为 1.0% 的样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 与 $k_B T/J$ 关系曲线; (b) x 为 1.0% 的样品的磁化率 $\chi/[(g\mu_B)^2/J]$ 与 $k_B T/J$ 关系曲线

我们用同样的方法计算了 x 为 2.0% 和 x 为 5.0% 样品的自发磁化强度和磁化率与约化温度的关系, 发现 x 为 2.0% 的样品具有铁磁性需要满足的条件是 n 取 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 且 K/J 取 0.096, 或 n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 且 K/J 取 0.058; x 为 5.0% 的样品具有铁磁性需要满足的条件是 n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 且 K/J 取 0.091, 或 n 取 $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 且 K/J 取 0.066. 图 5, 图 6 和图 7 分别给出了在 n 和 K 分别取相同值, x 为不同值的样品的自发铁磁化强度和磁化率与约化温度的关系. 图 5 显示: K/J 取 0.05, n 取 1×10^{20}

cm^{-3} 时, x 为 0.50% 的样品的 T_C 最高; x 为 2.0% 及 5.0% 的样品没有自发磁性. 图 6 显示: K/J 取 0.10, n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, x 为 2.0% 及 5.0% 的样品也具有了铁磁性, 且所有样品的 T_C 都得到了显著的提高. 其中, T_C 最高的是 x 为 1.0% 的样品; T_C 最低的是 x 为 5.0% 样品. 图 7 显示: K/J 取 0.10, n 取 $3.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, x 低于 2.0% 的样品, T_C 几乎没有变化; x 为 2.0% 样品的 T_C 有很大提高; x 为 5.0% 样品的 T_C 最高, 此结果与参考文献 [3] 的结论相符合.

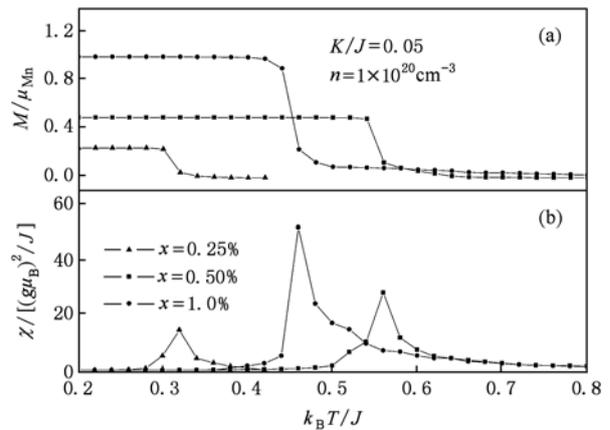


图5 (a) K/J 取 0.05, n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时各个样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 与 $k_B T/J$ 的关系曲线; (b) K/J 取 0.05, n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时各个样品的磁化率 $\chi/[(g\mu_B)^2/J]$ 与 $k_B T/J$ 的关系曲线

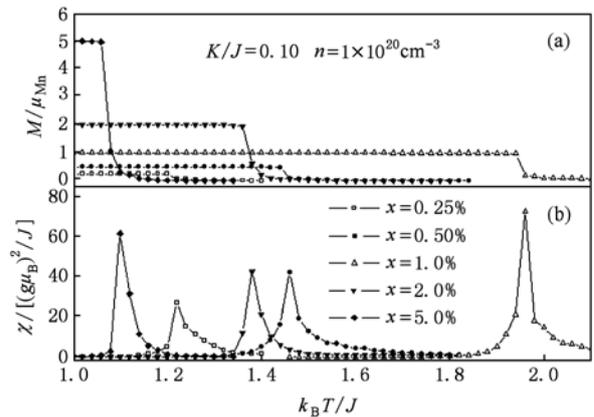


图6 (a) K/J 取 0.10, n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时各个样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 与 $k_B T/J$ 的关系曲线; (b) K/J 取 0.10, n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时各个样品的磁化率 $\chi/[(g\mu_B)^2/J]$ 与 $k_B T/J$ 的关系曲线

可见, 在 Mn 掺杂浓度低的样品中容易形成铁磁序. 例如, x 为 0.25% 的样品在 K/J 取 0.01, n 取 $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 的条件下就具有了自发磁矩. 其原因在

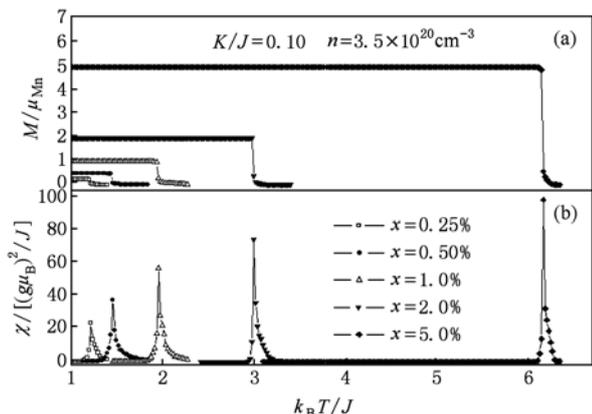


图7 (a) K/J 取0.10, n 取 $3.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时各个样品的磁化强度 M/μ_{Mn} 与 $k_B T/J$ 的关系曲线; (b) K/J 取0.10, n 取 $3.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时各个样品的磁化率 $\chi/[(g\mu_B)^2/J]$ 与 $k_B T/J$ 的关系曲线

于 Mn 掺杂浓度越低,以 O 为媒介的 3d 电子发生超交换作用的机会就越少,反铁磁交换作用在竞争中易处于弱势,所以在 n 和 K 很小的条件下,铁磁交换作用可以超过反铁磁交换作用.但是,这种样品由于 Mn 掺杂浓度过低,其自发磁化强度很小,故 T_C 也很低;即使提高 n ,这种样品自发磁化强度和 T_C 也不能得到改善.说明当 n 值达到形成铁磁序的阈值后,继续增加是没有意义的.这表明载流子自旋(赝自旋)对于铁磁交换作用只起到媒介的作用,而不能对系统的自发磁性有实质性的贡献;对系统自发磁化强度有贡献的只有磁性离子自旋.但是磁性离子浓度过高不利于铁磁序的形成,因为磁性离子间距缩小会导致超交换作用增大,反铁磁交换作用容易成为强势.因此,只有 n 值很高,同时 K 也很大的条件下, Mn 掺杂浓度高的样品才会形成铁磁序;然而这种磁有序状态并不稳定.例如 x 为 5% 的样品,在 K/J 取 0.10, n 取 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 的条件下,虽然有了自发磁矩,但是与其他样品相比,它的 T_C 是最低的,一旦受到热扰动,它的铁磁性就会消失.尽管当 n 值提高到 $3.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时,它的 T_C 远远超过了其他样品.但是,这个理论计算结果,到目前为止还没有得到实验的印证,这可能是相应的 n 值和 K 值不容易得到满足的缘故.与实验结果^[13]相符合,模拟结果显示: x 为 0.50%—1.0% 的样品,铁磁

序较为稳定, T_C 较高.这是由于 Mn 含量在这个范围内,以 O 为媒介的反铁磁交换作用处于劣势,而铁磁交换作用所需要的 n 值和 K 值都容易得到满足.而且,这个浓度的自旋浓度又不是很小.

该结果表明 $Zn_{1-x}Mn_xO$ 薄膜中的铁磁序的形成并不单纯地依赖于某一个参数,而是受到 x, n 和 K 的共同影响,它们的匹配关系影响着薄膜中铁磁交换作用与反铁磁交换作用的竞争结果, x 增大会加强反铁磁交换作用的竞争力; n 的增大会加强一部分(x 较大的)样品的铁磁交换作用的竞争力; K 的增大则会加强所有样品中铁磁交换作用的竞争力.说明 K 对铁磁序的诱导作用不但不能忽视,且有可能高于 n .如果人们能够充分认识 K 对铁磁序的诱导作用,摒弃 DMSs 中的铁磁序只单纯地依赖于 n 的理论,就不难理解,一些看似矛盾的研究结果^[5-7,3,32,33].比如有些 DMSs 载流子浓度很低,却具有室温铁磁性^[32,33].另外,充分认识 K 对铁磁序的诱导作用,还有助于理解一些实验重复率低^[1]的问题.因为 K 是由磁晶取向和排列状况决定的,是一个受制备过程、工艺细节和各种偶然因素影响很大的参数,所以实验结果往往难以控制.其实,实践中人们已经有意无意地应用了一些改善磁晶的各向异性常数的方法,例如不同气氛下退火^[34-36]以及共掺杂^[32,37]等,得到了比较理想的结果.

4. 结 论

$Zn_{1-x}Mn_xO$ 薄膜的磁性和 T_C 受到 x, n 和 K 的共同影响.随着 x 增大,自旋密度增大,而发生反铁磁交换作用的机会也增大,故 $Zn_{1-x}Mn_xO$ 薄膜的自发磁化强度并不与 x 成正比;空穴的自旋对自发磁化强度没有贡献;适度的提高 n 值有利于铁磁序的形成和 T_C 的提高,但该作用是有限.尽管 K 的增大不能增加自旋的总量,但 K 的增大有助于提高样品的铁磁性和居里温度.本研究结果虽然尚不能准确地定量给出各个样品的居里温度,但有助于理解 $Zn_{1-x}Mn_xO$ 的铁磁序形成机理,以及一些不易于理解的实验结果.并表明通过提高磁各向异性常数,可以有效地提高居里温度.

- [1] Yan G Q, Xie K X, Mo Z R, Lu Z L, Zou W Q, Wang S, Yue F J, Wu D, Zhang F M, Du Y W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1237 (in Chinese) [严国清、谢凯旋、莫仲荣、路忠林、邹文琴、王申、岳凤娟、吴镛、张凤鸣、都有为 2009 物理学报 **58** 1237]
- [2] Chen J, Jin G J, Ma Y Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2707 (in Chinese) [陈静、金国钧、马余强 2009 物理学报 **58** 2707]
- [3] Dietl T, Ohno H, Mstukura F, Ciber J, Ferand D 2000 *Science* **287** 1019
- [4] Peng Y Z, Thomas L, Song W D, Chong T C 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5501
- [5] Sharma V K, Xalxo R, Varma G D 2007 *Cryst. Res. Technol.* **42** 34
- [6] Zheng R K, Liu H, Zhang X X 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 2589
- [7] Lawes G, Risbud A S, Ramirez A P, Seshadri R 2005 *Phys. Rev. B* **71** 045201
- [8] Kimd H, Yang J S, Leek W 2003 *Appl. Phys. Lett.* **81** 2421
- [9] Kim Y M, Yoon M, Park I W 2004 *Solid State Commun.* **129** 175
- [10] Wang Y, Sun L, Han D D, Liu L F, Kang J F, Liu X Y, Zhang X, Han R Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6651 (in Chinese) [王漪、孙雷、韩德栋、刘力锋、康晋锋、刘晓彦、张兴、韩汝琦 2006 物理学报 **55** 6651]
- [11] Chamber S A, Droubay T, Wang C M, Lea A S, Farrow R F C, Folks L, Deline V, Anders S 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 1257
- [12] Céspedes E, Castro G R, Jiménez-Villacorta F, Andrés A D, Prieto C 2008 *Phys. Condens. Matter* **20** 095207 (9pp)
- [13] Yu Z, Li X, Long X, Cheng X W, Wang J Y, Liu Y, Gao M S, Wang F C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4539 (in Chinese) [于宙、李祥、龙雪、程兴旺、王晶云、刘颖、曹茂盛、王富耻 2008 物理学报 **57** 4539]
- [14] Anderson P W 1950 *Phys. Rev.* **79** 350
Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 730
- [15] Zener C 1951 *Phys. Rev.* **81** 440
- [16] García M A, Ruiz-González M L, Quesada A, Costa-Krämer J L, Fernández J F, Khatib S J, Wennberg A, Caballero A C, Martín-González M S, Villegas M, Briones F, González-Calbet J M, Hernando A 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 217206
- [17] Coey J M D, Venkatesan M, Fitzgerald C B 2005 *Nat. Mater.* **4** 173
- [18] Egger R, Schoeller H 1996 *Czech. J. Phys.* **46** (Suppl 4) 1909
- [19] Kittilstved K R, Norberg S N, Gamelin R D 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 147209
- [20] Heo Y W, Ivill M P, Ip K, Norton D P, Peartona S J 2004 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2292
- [21] Ivill M, Pearton S J, Norton D P, Kelly J, Hebard A F 2005 *Appl. Phys. Lett.* **97** 053904
- [22] Erhan A, Ali Y 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4193
- [23] Luo Z Hu, Loan M, Liu Y, Lin J R 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2696
- [24] Wang Z F, Chen L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2048
- [25] Zaim A, Amraoui Y EL, Kerouad M, Arhouchi H 2008 *Magn. Magn. Mater.* **320** 1030
- [26] Tomasz M R 1996 *Phys. Rev. B* **53** 12577
- [27] Balcerzak T A 2007 *Magn. Magn. Mater.* **310** 1651
- [28] Twardowski A 1991 *Phys. Scri. T* **39** 124
- [29] Ye Z Z, Lv J G, Zhang Y Z, He H P 2009 *ZnO: Doping and Application* (Hangzhou: Zhejiang University Press) p 48 (in Chinese) [叶志镇、吕建国、张银珠、何海平 2009 氧化锌半导体材料掺杂技术与应用 (杭州: 浙江大学出版社) 第 48 页]
- [30] Li Z Z 2002 *Solid State Theory* (Volume 2) (Beijing: High Education Press) p511 (in Chinese) [李正中 2002 固体理论 (北京: 高等教育出版社) 第 511 页]
- [31] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 1998 *Semiconductor Physics* (Volume 1) (Xi'an: Xi'an Jiao Tong University Press) p100—103 (in Chinese) [刘恩科、朱秉升、罗晋生 1998 半导体物理学 (西安: 西安交通大学出版社) 第 100—103 页]
- [32] Xu H Y, Lin Y C, Xu C S, Liu Y X, Shao C L, Mu R 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 242502
- [33] Griffin K A, Parkhomov A B, Wang C M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 157204
- [34] Ramachandran S, Narayan J, Prater J T 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 242503
- [35] Hsu H S, Huang C A 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 242507
- [36] Kittilstved K R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 037203
- [37] Ivill M, Pearton S J, Heo Y W, Kelly J, Hebard A F, Norton D P 2007 *Appl. Phys.* **101** 123909

Monte Carlo simulation on the property of ferromagnetic order of $Zn_{1-x}Mn_xO$ Nanofilms*

Gao Qian Lou Xiao-Yan Qi Yang[†] Shan Wen-Guang

(School of Science, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

(Received 31 December 2009; revised manuscript received 21 June 2010)

Abstract

Based on the analysis of ferromagnetic mechanism of diluted magnetic semiconductors (DMSs), an Ising model with multi-exchange interactions is established. The reason of the shape of ferromagnetic order is simulated by Monte Carlo (MC) simulation with the Metropolis algorithm. The result reveals that the lower concentrations of Mn doping (x) are helpful for forming the ferromagnetic order. However, with the lower concentrations of Mn doping the magnetization of the system will be smaller and the Curie temperature will be lower. The modifying effect of carrier on the formation of ferromagnetism is enhanced with the increase of x and the decrease of the anisotropy constant (K). This work predicts that the increase of K will heighten the ferromagnetism and the Curie temperature.

Keywords: diluted magnetic semiconductors, $Zn_{1-x}Mn_xO$ nanofilm, Ising multilayer, Monte Carlo simulation

PACS: 64.60.De, 72.25.Hg, 75.30.Hx, 75.50.Pp

* Project supported by the Science Research Program of Liaoning Province (Grant No. 200822208) and the Shenyang Municipal Science Research Program (Grant Nos. 1091139-9-00,60573065).

[†] Corresponding author. E-mail: qiyang@imp.neu.edu.cn