

p, n 型掺杂剂与 Mn 共掺杂 GaN 的电磁性质*

邢海英[†] 范广涵[‡] 周天明

(华南师范大学光电子材料与技术研究所, 广州 510631)

(2008 年 9 月 13 日收到, 2008 年 11 月 4 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 Mg, Zn, Si, O 和 Mn 共掺 GaN, 分析比较共掺杂后的电子结构和磁学性质, 并分别用平均场近似的海森伯模型和 Zener 理论估算共掺杂后体系的居里温度(T_c). 计算表明: 共掺杂后体系均在能隙深处产生自旋极化杂质带, 具有半金属性, 能产生自旋注入. p 型共掺杂(GaN:Mn-Mg \ Zn)后体系具有较 GaN:Mn 更稳定的 FM 态且能使 T_c 升高; 而 n 型共掺杂(GaN:Mn-Si \ O)后体系 FM 态稳定性和 T_c 较 GaN:Mn 降低.

关键词: Mg, Zn, Si, O 和 Mn 共掺 GaN, 第一性原理, 居里温度(T_c), 磁学性质

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

1. 引 言

稀磁半导体(diluted magnetic semiconductor, DMS)主要应用在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. 因其利用电子的电荷特性和自旋特性使材料同时具备半导体材料和磁性材料的特性而具有重要的应用价值, 故受到众多研究者的密切关注. Ohno 等人^[1]率先制备了居里温度(T_c)为 110 K 的稀磁半导体 GaAs:Mn, 证实了将磁性引入传统半导体的可行性. 此后, 研究人员对其他种类的稀磁半导体也进行了许多研究. 而理论预测 Mn 掺杂 GaN 的 T_c 可高于室温^[2-7], 使制备室温铁磁性 GaN:Mn 成为研究热点. 目前多组研究者已成功制备了 T_c 高于室温的 GaN:Mn 薄膜. 虽然这些研究实现了室温铁磁性, 但材料多表现为高阻抗^[8-12], 不易于测量研究其磁传输特性. 例如高阻抗 GaN:Mn 材料限制了反常霍尔效应测量, 这项测试技术依赖于材料中载流子的输运. 上述被限制的原因与材料中调制载流子的性质有关, 比如在 GaAs:Mn 体系中, Mn 取代 Ga 同时在价带中提供局域磁矩和高浓度空穴; 而 GaN:Mn 的情况则完全不同, Mn

的掺入在带隙中产生源于 Mn 3d 能带与 N 2p 轨道杂化而成的自旋极化杂质带, 位于价带顶上方 1.02 eV 处, 为深受主能级^[13], 其空穴位于深能级的杂质带中, 使得杂质带中的电导需通过跃迁机理(hopping mechanism)才能实现, 因此导致 GaN:Mn 的高阻抗. 研究表明, 采用 GaN:Mn 中共掺 p 型或 n 型掺杂剂的方法可改善材料的高阻抗现象^[14, 15]. 本文基于共掺杂原理, 采用密度泛函理论(density functional theory, DFT)的平面波赝势法(plane-wave pseudopotential, PWP), 从理论上计算 Mg, Zn, Si, O 和 Mn 共掺杂 GaN(即 p 型共掺杂 GaN:Mn-Mg \ Zn, n 型共掺杂 GaN:Mn-Si \ O), 分析比较共掺后体系电子结构的变化, 并分析共掺对体系磁学性质和 T_c 的影响, 以便为实验研究提供有意义的数据参考.

2. 模型结构和计算方法

2.1. 理论模型

理想 GaN 多为六方纤锌矿结构, 属于 $P6_3mc$ 空间群, 对称性为 C_{6v}^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

* 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), 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

结构的 1.633 小,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.文中计算基于超晶胞模型,选取 32 原子超晶胞体系,分别由 Mn 和 Mg、Zn、

Si 替代体系中的 Ga 以及由 Mn 和 O 分别替代体系中的 Ga 和 N 原子实现共掺,超晶胞模型如图 1 所示.

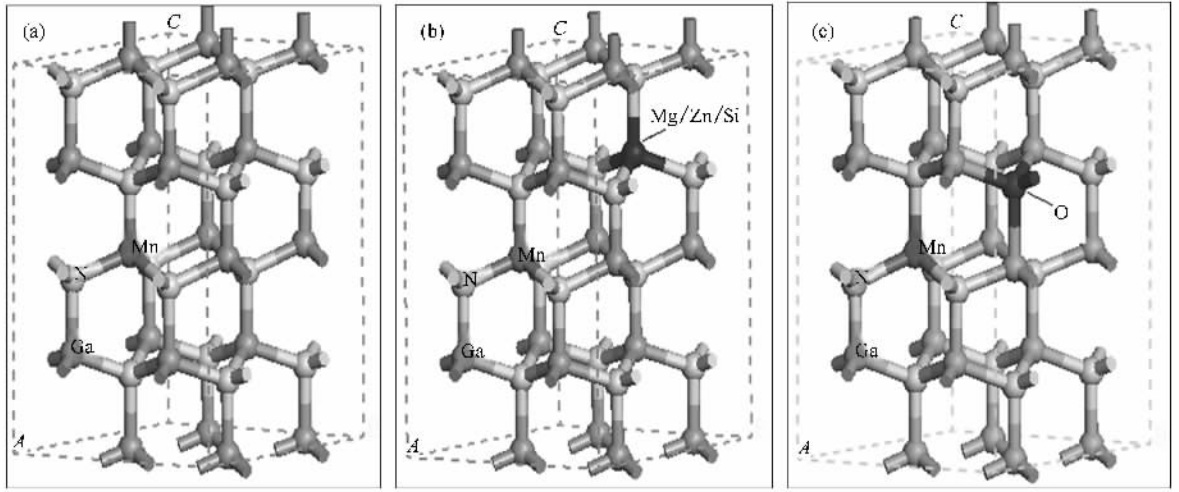


图 1 32 原子体系超晶胞结构图 (a) $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}$ (b) $\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Mg}(\text{Zn/Si})_{0.0625}\text{N}$ (c) $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}_{0.9375}\text{O}_{0.0625}$

2.2. 计算方法

文中计算工作基于 DFT 的从头算量子力学程序 CASTEP^[16]完成.计算中,采用周期性边界条件,利用广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)的 PBE 处理电子间的交换关联能.电子波函数通过平面波基矢组扩展,并采用超软赝势^[17]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、Mg、Zn、Si、O 的价电子组态分别为 Ga: $3d^{10}4s^24p^1$, N: $2s^22p^3$, Mn: $3d^54s^2$, Mg: $2p^63s^2$, Zn: $3d^{10}4s^2$, Si: $3s^23p^2$, O: $2s^22p^4$.文中所有计算在倒易的 k 空间中选取 $E_{\text{cut}} = 400$ eV,其他计算参数的具体设置和计算步骤详见文献[13,18].此软件包计算精度已在文献[13,18]中做了评价,对于 GaN 体系,几何优化后得到的理论晶胞参数与实验值间的偏差仅为 0.18%,说明该计算方法准确可靠.

3. 计算结果与讨论

为便于与共掺杂体系(p 型共掺杂 GaN:Mn、Mg、Zn 与 n 型共掺杂 GaN:Mn-Si、O)的计算结果分析比较,文中给出 Mn 掺杂 GaN (GaN:Mn)的计算结果.

3.1. Mn 掺杂 GaN 的计算^[13]

图 2 为 $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}$ 能带结构图.如图所示 Mn 掺杂 GaN 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(即 Γ 点)处. Mn 掺入最显著的特征是能带图中出现与 Mn 有关的自旋极化杂质带,位于价带顶上方即 $E_{\text{v}} + 1.02$ eV 处,为深受主能级.该结果与理论^[19]和实验^[20]相符合. E_{F} 贯穿于杂质带中,材料表现为半金属性.自旋向上(spine-up)态占据费米面,自旋向下(spine-down)态未占据费米面,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% 的自旋极化载离子注入.图 3 为 $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}$ 的分波态密度图.如图 3(a)所示 spine-up 态 E_{F} 穿过 Mn 3d 杂质带, spine-down 态 Mn 3d 能带位于 E_{F} 之上,说明体系为半金属性.若载离子在其中具有足够的迁移率,那么从 $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{N}$ 注入的载离子将产生 100% 的自旋极化.上述结果与能带图中观察到的现象是一致的,该计算结果与 Kim 等^[21]采用第一性原理进行的能带计算结果相符.图 3(b)为(a)中 Mn 3d 的 t_a 态峰值处的放大图,清楚显示 E_{F} 离 t_a 态峰值较远.

Mn 掺杂 GaN 改变体系电子结构主要有两方面:1)五重简并的 Mn 3d 能级在四面体的晶场中分裂成二度简并的 e 轨道($3z^2 - r^2$ 和 $x^2 - y^2$)与三度

简并的 t_2 轨道 (xy , yz 和 zx). E_F 位于 t_2 轨道中, 使 t_2 轨道处于半填满状态; e 轨道位于价带中. Mn 的 t_2 轨道与邻近的 N 原子 $2p$ 轨道杂化, 使被占据的成键 t_2 (即 t_b 态) 轨道移入价带, 反键的 t_2 (即 t_a 态) 轨道位于非成键的 e 轨道之上, 如图 3 所示. 反键的 t_2 态位于 E_F 处, 引入局域磁矩, 并具有巡游特性. 2) 当 Mn 离子替代 Ga 离子作为受主会从体系中俘获电子而提供空穴, 且 Mn 具有部分占据的电子组态所以

3d 电子具有巡游特性^[22]. Akai^[23] 研究认为, DMS 中的磁性是由于双交换作用(使 DMS 具有 FM 态)和超交换作用(使 DMS 具有磁无序状态)之间的竞争而定. 竞争中双交换作用占优势, 材料表现为 FM 态; 反之材料表现为磁无序状态. 而具有巡游特性是双交换起作用的主要原因, 由此可作为我们初步判断材料是否具有 FM 性的出发点, 也可作为推知 GaN : Mn 具有 FM 性的一个证据.

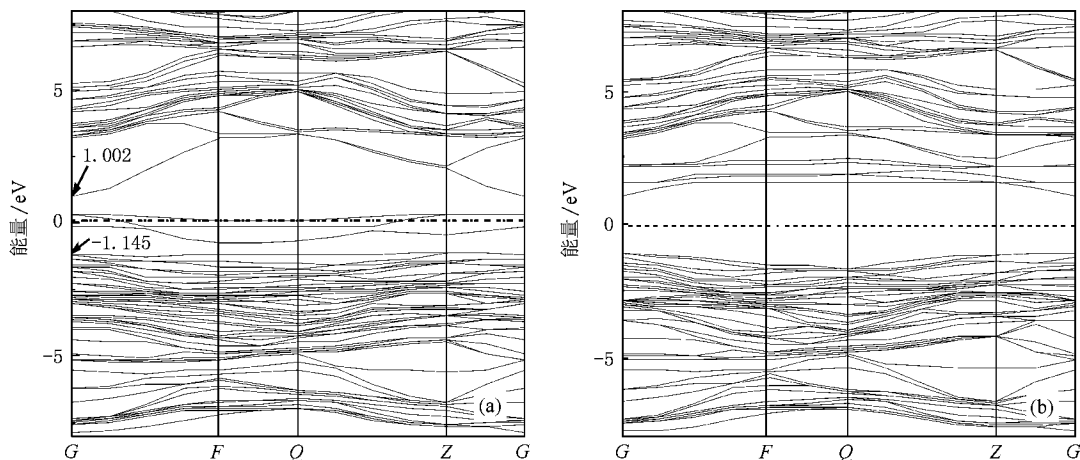


图 2 $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$ 能带结构图 (a) $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$ 自旋向上 (b) $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$ 自旋向下

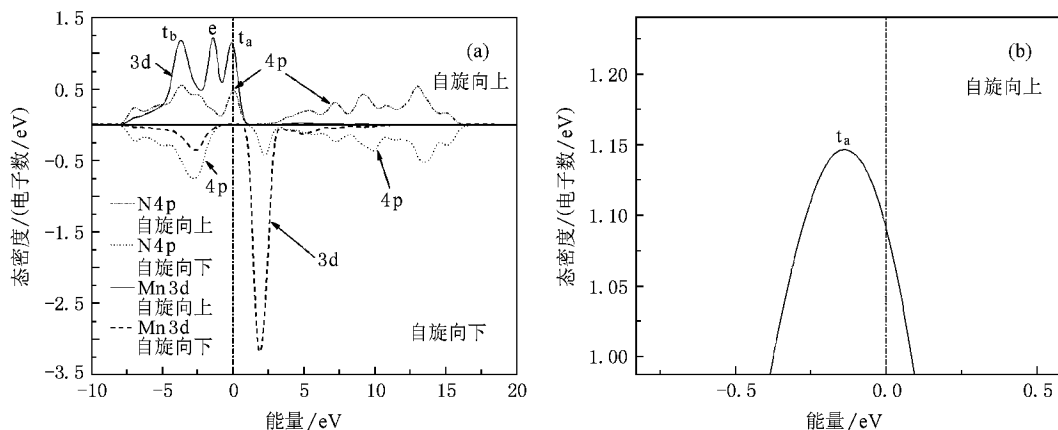


图 3 $Ga_{0.9375}Mn_{0.0625}N$ 分波态密度图

3.2. Mg, Si, Zn, O 和 Mn 共掺杂 GaN 计算

图 4 为共掺杂体系 (p 型共掺杂 GaN : Mn-Mg \ Zn 与 n 型共掺杂 GaN : Mn-Si \ O) 的能带结构图. 如图所示, 共掺杂后体系仍为直接禁带半导体, spin-up 态中 E_F 位于带隙深处的自旋极化杂质带中, 材料仍具有半金属性. 表 1 为共掺杂后体系能隙相关值

以及 AFM 态与 FM 态间的能量差 ΔE . 如表中数据所示, 共掺杂后 E_g 均较 GaN : Mn 减小; 对 p 型共掺杂 (GaN : Mn-Mg \ Zn), 杂质带宽度由 GaN : Mn 时的 0.47 eV 分别增至 0.70 eV (GaN : Mn-Mg) 和 0.79 eV (GaN : Mn-Zn), E_F 向价带移动; 对 n 型共掺杂 (GaN : Mn-Si \ O), E_F 向导带移动, 杂质带没有明显加宽, 其中 GaN : Mn-Si 的杂质带宽还略有减小. 比较图

(a) $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}$ 和图 4 的能带图可得出上述结论。

由表 1 列出的 AFM 态与 FM 态间的能量差 ΔE 可以判断掺杂后体系 FM 态的稳定性。当 $\Delta E > 0$ 时说明掺杂后体系的具有 FM 态。如表中数据所示, $\text{GaN}:\text{Mn}$ 和几个共掺杂体系的 ΔE 均为正值, 说明掺杂后体系均具有 FM 态。但是 n 型共掺杂中 $0 < \Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}:\text{Si}:\text{O}} < \Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}}$, 而 p 型共掺杂的 $\Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}:\text{Mg}:\text{Zn}} > \Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}}$, 说明 p 型共掺杂较 n 型共掺杂具有更为稳定的 FM 态。此外根据平均场近似的海森伯模型, 由 ΔE 可以估算 DMS 的 T_C [24-25]。海森伯模型为

$$H_{ij} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} S_i \cdot S_j, \quad (1)$$

式中, J_{ij} 是 i 位置和 j 位置之间的交换作用系数; S_i 是 i 位置磁矩矢量。由海森伯模型计算可得

$$\Delta E^H = S^2 C^2 \sum_{n \neq 0} J_{n_0}, \quad (2)$$

式中 C 是磁性离子的浓度; n 是对所有阳离子求和; ΔE^H 可近似地认为是根据第一性原理计算的 AFM 态与 FM 态之间的能量差 ΔE 。另一方面, 由分子场理论的 Brillouin 公式

$$k_B T_C = \frac{2}{3} S^2 C \sum_{n \neq 0} J_{n_0}, \quad (3)$$

式中 k_B 为玻尔兹曼常数。由 (2) (3) 两式可推得

$$k_B T_C = 2\Delta E/3C. \quad (4)$$

比较表中数据得

$0 < \Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}:\text{Si}:\text{O}} < \Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}} < \Delta E_{\text{GaN}:\text{Mn}:\text{Mg}:\text{Zn}}$, 故可由 (4) 式推知 p 型共掺杂可获得比 $\text{GaN}:\text{Mn}$ 更高的 T_C , 而 n 型共掺杂后体系的 T_C 较 $\text{GaN}:\text{Mn}$ 降低。

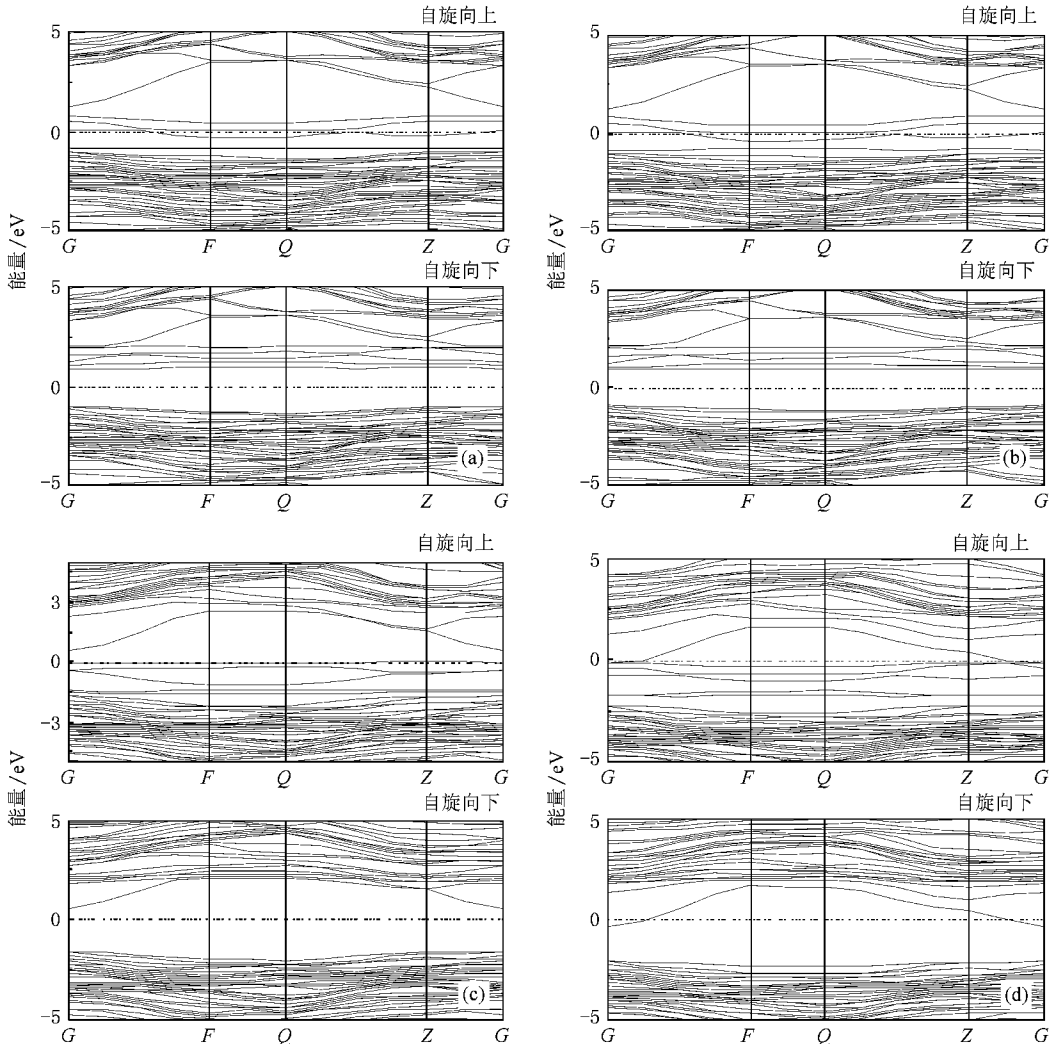


图 4 共掺杂体系的能带结构图 (a) $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}$ (b) $\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Zn}_{0.0625}\text{N}$ (c) $\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Si}_{0.0625}\text{N}$ (d)

$\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{O}_{0.0625}\text{N}$

表 1 共掺杂后能隙相关值及其 AFM 态与 FM 态间的能量差 ΔE

掺杂组分	带隙 E_g /eV	杂质带位置/eV	杂质带宽/eV	E_F 与导带间距/eV	ΔE /eV
$\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}$	2.15	$E_v + 1.02$	0.47	1.00	0.169
$\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Mg}_{0.0625}\text{N}$	2.08	$E_v + 0.94$	0.70	1.23	0.219
$\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Zn}_{0.0625}\text{N}$	2.03	$E_v + 0.91$	0.79	1.22	0.221
$\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Si}_{0.0625}\text{N}$	2.00	$E_v + 0.98$	0.43	0.57	0.132
$\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}_{0.9375}\text{O}_{0.0625}$	1.62	$E_v + 1.01$	0.57	0.15	0.129

图 5 为共掺杂体系的分波态密度图,如图所示共掺杂后体系的杂质带宽和 E_F 能级位置的变化与能带图中结论是一致的.此外由于 p 型共掺杂的 Mg 和 Zn 取代 Mn 为异价掺杂,形成受主能级而提供空穴.如图 5(a)(b)所示,spin-up 态中 E_F 处分别出现 Mg 的 2p 态和 Zn 的 4s 态,它们几乎在同一区域与

Mn 3d 态交叠,使得由 Mg 和 Zn 掺杂提供的空穴具有 Mn 3d 电子的巡游特性,这是稳定 FM 态的双交换作用所必须的.我们对 GaN:Mn 和 p 型共掺杂体系 E_F 以上 spin-up 的 Mn 3d 态密度积分,GaN:Mn 为 0.478,GaN:Mn-Mg 为 0.740,GaN:Mn-Zn 为 0.752.与 GaN:Mn 比较,GaN:Mn-Mg \ Zn 的杂质带加宽, E_F

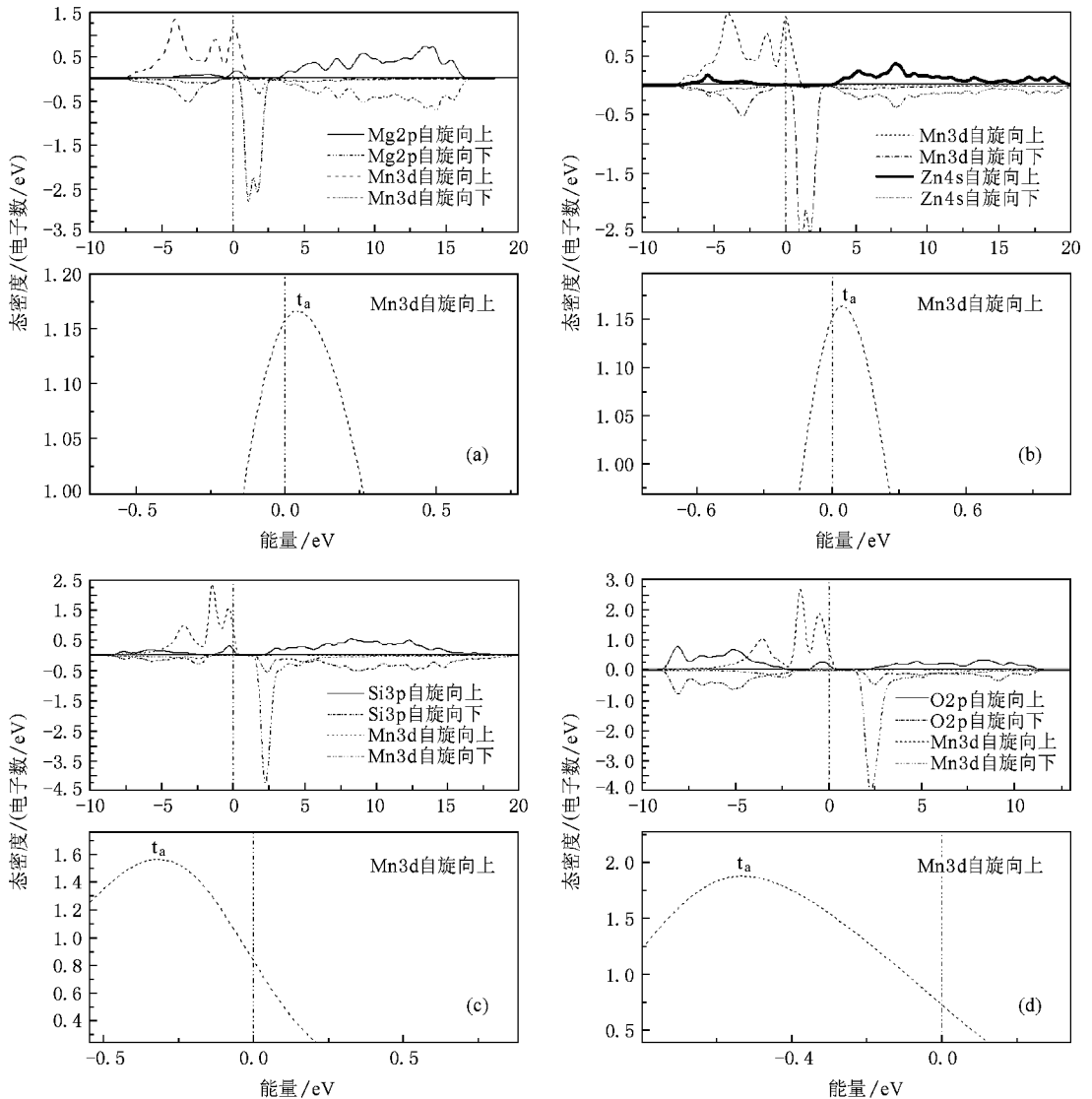


图 5 共掺杂体系的分波态密度图 (a) $\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Mg}_{0.0625}\text{N}^{[18]}$ (b) $\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Zn}_{0.0625}\text{N}$ (c) $\text{Ga}_{0.875}\text{Mn}_{0.0625}\text{Si}_{0.0625}\text{N}^{[18]}$; (d) $\text{Ga}_{0.9375}\text{Mn}_{0.0625}\text{N}_{0.9375}\text{O}_{0.0625}$

向价带移动且 E_F 处空穴的密度增加, 因此 p 型共掺杂在稳定材料 FM 态的同时还可以增加材料的电导, 改善高阻抗现象. Kim^[14] 实验测得 Mg 共掺杂后材料阻抗由 GaN :Mn 的 $9.5 \Omega\text{cm}$ 降至 $0.025 \Omega\text{cm}$, 并显著增加材料的磁性. n 型共掺杂的两个体系中 Si 和 O 分别取代 Mn 和 N, 形成浅施主能级而提供电子, 补偿 GaN :Mn 中 E_F 附近由 Mn 3d 态构成的空穴态, E_F 向导带移动使 Mn 3d 态趋于填满, 使 E_F 处可移动的空穴减少. 由于补偿作用使具有巡游特性的 3d 载流子减少, 故 n 型共掺杂后材料的 FM 态稳定性较 GaN :Mn 降低 ($0 < \Delta E_{\text{GaN :Mn-Si} \setminus \text{O}} < \Delta E_{\text{GaN :Mn}}$). 此外, n 型共掺杂后体系中形成浅施主能级增加材料的电导. 有实验^[15]证实, Mn, O 共掺杂 GaN 材料的阻抗降低, 霍尔 (Hall) 测试材料为 n 型且载流子浓度为 $3 \times 10^{18}/\text{cm}^3$, 但材料的磁性无明显改变.

图 5 中还给出各共掺杂体系 Mn 3d 的 t_a 态峰值处的放大图, 可清楚显示 E_F 离 t_a 态峰值的位置. 比较图 5 与图 3(b), p 型共掺杂 (GaN :Mn-Mg/Zn) 的 E_F 接近 t_a 态峰值, 使 E_F 处的 Mn 3d 的分波态密度 $n_{3d}(E_F)$ 值较 GaN :Mn 时增大; n 型共掺杂 (GaN :Mn-Si/O) 的 E_F 远离 t_a 态峰值, 使 E_F 处的 $n_{3d}(E_F)$ 值较 GaN :Mn 时大幅减小. 根据 Zener 理论, T_C 与 $n_{3d}(E_F)$ 和杂质带宽度 W (见表 1) 存在如下比例关系^[26]:

$$T_C \propto W n_{3d}(E_F). \quad (5)$$

由此根据上述计算结果推知, 与 GaN :Mn 比较, p 型共掺杂能使体系的 T_C 升高, 而 n 型共掺杂不会使 T_C 升高. 该计算结果与上述平均场近似的海森伯模型的结果一致.

由体系共掺杂前后的态密度分析可知, GaN :Mn 在 E_F 处 spin-up 的 Mn 3d 态为类空穴特性, 且为部分占据的电子组态, 具有巡游非局域特性. 在 p 型共掺杂的 E_F 处, spin-up 态中 Mg 和 Zn 分别与 Mn 3d

交叠杂化, 使 Mg 和 Zn 提供的空穴具有 Mn 3d 的巡游非局域特性, 且 E_F 以上 spin-up 的 Mn 3d 态积分密度增加, 说明具有巡游特性的空穴增加, 使双交换作用进一步加强. 所以 p 型共掺杂体系的 FM 态更加稳定, 表现为 ΔE 值增大 (见表 1). 在 n 型共掺杂体系中, Si 和 O 均形成浅施主而提供电子, 补偿 GaN :Mn 中 E_F 处的 Mn 3d 空穴, 使 E_F 处具有巡游特性的空穴减少. 故双交换作用减弱使 FM 态稳定性趋于降低, 超交换作用加强使 AFM 态稳定性趋于增加, 表现为 ΔE 值减小 (见表 1).

4. 结 论

采用密度泛函理论的第一性原理平面波赝势法计算 Mg, Zn, Si, O 和 Mn 共掺杂 GaN, 分析共掺杂后体系电子结构和磁学性质的变化. 计算表明, 共掺杂后体系仍为直接禁带半导体, 在带隙深处都产生自旋极化杂质带, 体系都表现为半金属性. 与 GaN :Mn 比较, p 型共掺杂 (GaN :Mn-Mg \setminus Zn) 的杂质带明显加宽, E_F 向价带移动, 并接近 t_a 态峰值, 使 T_C 升高; 另外, 体系的 $\Delta E_{\text{GaN :Mn-Mg} \setminus \text{Zn}} > \Delta E_{\text{GaN :Mn}}$, 说明 p 型共掺杂较 GaN :Mn 具有更稳定的 FM 态且能使 T_C 升高. 而 n 型共掺杂 (GaN :Mn-Si \setminus O) 的杂质带较 GaN :Mn 没有明显加宽 (GaN :Mn-Si 的杂质带宽略有减小), E_F 向导带移动, 并远离 t_a 态峰值; 同时体系的 $0 < \Delta E_{\text{GaN :Mn-Si} \setminus \text{O}} < \Delta E_{\text{GaN :Mn}}$, 说明 n 型共掺杂后体系 FM 态稳定性和 T_C 较 GaN :Mn 降低. 综上所述, 本文认为 1) 共掺杂会影响体系 FM 态的稳定性和 T_C ; 2) 通过采用 p 型或 n 型掺杂剂与 Mn 共掺杂 GaN 的方法在改善 GaN :Mn 高阻抗现象的同时, 选用 p 型掺杂剂可以获得较 GaN :Mn 更稳定的 FM 态且能使 T_C 升高.

[1] Matsukura F, Ohno H, Shen A, Sugawara Y 1998 *Phys. Rev. B* **57** R2037

[2] Dietl T, Ohno H, Matsukura F, Cibert J, Ferrand D 2000 *Science* **287** 1019

[3] 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, Palmström C J, Crowell P A 2005 *Science* **309** 2191

[5] Van Schilfgaarde M, Mryasov O N 2001 *Phys. Rev. B* **63** 2332052

[6] Jungwirth T, Kêinig J, Sinova J 2002 *Phys. Rev. B* **66** 0124022

[7] Sato K, Katayama-Yoshida H 2001 *Jpn. J. Appl. Phys.* **40** L485

[8] Dhar S, Brandt O, Trampert A, Däweritz L, Friedland K J, Ploog K H 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 2077

[9] Overberg M E, Thaler G T, Abernathy C R, Theodoropoulou N A, McCarthy K T, Arnason S B 2003 *Journal of Electronic Materials* **32** 298

[10] Reed M L, El-Masry N A, Stadelmaier H H, Ritums M K, Reed M J, Parker C A, Roberts J C, Bedair S M 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3473

- [11] Sasaki T ,Sonoda S ,Yamamoto Y ,Ken-ichi Suga ,Shimizu S ,Kindo K ,Hori H 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 7911
- [12] Thaler G T ,Overberg M E ,Gila B ,Frazier R ,Abernathy C R ,Pearson S J ,Lee J S ,Lee S Y ,Park Y D ,Khim Z G ,Kim J ,Ren F 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3964
- [13] Xing H Y ,Fan G H ,Zhao D G ,He M ,Zhang Y ,Zhou T M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6513 (in Chinese) [邢海英、范广涵、赵德刚、何苗、章勇、周天明 2008 物理学报 **57** 6513]
- [14] Kim K H ,Lee K J ,Kim D J ,Kim H J ,Ihm Y E 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 4755
- [15] Thaler G ,Frazier R ,Gila B ,Stapleton J 2005 *Electrochemical and Solid-State Letter* **8** C20
- [16] Segall M D ,Lindan P ,Probet M J ,Pickard C J ,Hasnip P J ,Clark S J ,Payne M C 2002 *J. Phys. Condens. Matter.* **14** 2717
- [17] Vanderbilt D ,1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [18] Xing H Y ,Fan G H ,Zhang Y ,Zhao D G 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 450 (in Chinese) [邢海英、范广涵、章勇、赵德刚 2008 物理学报 **57** 450]
- [19] Schilfgaarde M van ,Myrasov O N 2000 *Phys. Rev. B* **63** 233205
- [20] Korotkov R Y ,Griegie J M ,Wessels B W 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 1731
- [21] Kim J J ,Makino H 2003 *Materials Science in Semi. Pro.* **6** 503
- [22] Schneider J ,Kaufmann U ,Wilkening W 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 20
- [23] Akai H 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3002
- [24] Sato K ,Dederichs P H ,Katayama-Yoshida H 2003 *Europhys. Lett.* **61** 403
- [25] Lin Q B ,Li Q R ,Zeng Y Z ,Zhu Z Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 873 (in Chinese) [林秋宝、李仁全、曾永志、朱梓忠 2006 物理学报 **55** 873]
- [26] Dinh V A ,Sato K ,Katayama-Yoshida H 2004 *J. Phys. :Condens. Matter* **16** S5705

Electronic and magnetic properties of p ,n type dopant and Mn co-doped GaN *

Xing Hai-Ying[†] Fan Guang-Han[‡] Zhou Tian-Ming

(Institute of Optoelectronic Material and Technology ,South China Normal University ,Guangzhou 510631 ,China)

(Received 13 September 2008 ; revised manuscript received 4 November 2008)

Abstract

Calculation of electronic structures and magnetic properties of Mg (or Zn \ Si \ O) and Mn co-doped GaN were carried out by means of first-principle plane-wave pseudopotential (PWP) based on density functional theory. Estimation of Curie temperature was achieved by using Heisenberg model in the mean-field approximation and Zener theory ,respectively. The spin polarized impurity bands of deep energy levels are found for several co-doped systems , which are half metallic and suitable for spin injectors. Compared with GaN :Mn ,p-type co-doped (GaN :Mn-Mg \ Zn) systems exhibit more stable ferromagnetic state and a significant increase in T_C . Nevertheless ,n-type co-doped (GaN :Mn-Si \ O) systems fail to increase the T_C and stability of ferromagnetic state.

Keywords : Mg ,Zn ,Si ,O and Mn co-doping GaN , first-principles , T_C , magnetic 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 Project of Science and Technology of Guangdong Province ,China (Grant No. 2006A10802001) ,the Key Research Project of Science and Technology of Guangzhou ,Guangdong Province ,China (Grant No. 2005Z12D0071) ,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@senu.edu.cn