

Gd 掺杂 ZnO 纳米线磁耦合性质的第一性原理研究

张燕如 张琳 任俊峰 原晓波 胡贵超

Magnetic coupling properties of Gd-doped ZnO nanowires studied by first-principles calculations

Zhang Yan-Ru Zhang Lin Ren Jun-Feng Yuan Xiao-Bo Hu Gui-Chao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 178103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.178103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.178103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Eu 掺杂 Si 纳米线的光致发光特性

Photoluminescence properties of Eu doped Si nanowires

物理学报.2015, 64(14): 148103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.148103>

弯曲 Cu 纳米线相干 X 射线衍射图的计算

Calculation of coherent X-ray diffraction from bent Cu nanowires

物理学报.2015, 64(13): 138102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.138102>

AuPd 纳米粒子作为催化剂制备硼纳米线及其场发射性质

Preparation of boron nanowires using AuPd nanoparticles as catalyst and their field emission behaviors

物理学报.2014, 63(4): 048102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.048102>

ZnO 纳米线薄膜的合成参数、表面形貌和接触角关系研究

Relationships between synthesizing parameters morphology and contact angles of ZnO nanowire films

物理学报.2013, 62(21): 218102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.218102>

钒掺杂 $W_{18}O_{49}$ 纳米线的室温 p 型电导与 NO_2 敏感性能

P-type conductivity and NO_2 sensing properties for V-doped $W_{18}O_{49}$ nanowires at room temperature

物理学报.2013, 62(20): 208104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.208104>

Gd掺杂ZnO纳米线磁耦合性质的 第一性原理研究*

张燕如 张琳 任俊峰[†] 原晓波 胡贵超

(山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

(2015年2月11日收到; 2015年4月24日收到修改稿)

本文利用基于密度泛函理论的第一性原理方法计算了钆(Gd)掺杂氧化锌(ZnO)纳米线的磁耦合特性. 讨论了两个Gd原子替换ZnO纳米线中不同位置Zn原子的各种可能情况. 计算发现, ZnO中掺杂的Gd原子处于相邻的位置时它们之间的相互作用是铁磁性的, 并且体系的铁磁性可以通过注入合适数目的电子来得到加强. 同时发现Gd掺杂ZnO纳米线后s-f耦合作用变得显著, 使得体系的铁磁性变得更加稳定, 这也是Gd掺杂ZnO纳米线呈现铁磁性的原因. 这些结果为实验上发现的Gd掺杂ZnO纳米线呈铁磁性提供了理论依据.

关键词: Gd掺杂ZnO纳米线, 磁耦合, 第一性原理**PACS:** 81.07.Gf, 75.75.-c, 31.15.A-**DOI:** 10.7498/aps.64.178103

1 引言

稀磁半导体由于具有优异的磁学、磁电学、磁光学等性能而受到人们广泛的关注, 它可以用于半导体电子器件, 使得信息处理和存储相结合, 因而应用前景广阔^[1,2]. 氧化锌(ZnO)基稀磁半导体材料是目前稀磁半导体研究领域的热点之一^[3,4]. ZnO的能带隙和激子束缚能均较大, 透明度高, 有优异的常温发光性能, 在半导体领域的液晶显示器、薄膜晶体管、发光二极管等产品中均有应用. 同时人们理论上预测ZnO在室温下有存在铁磁性的可能^[4-6]. 多种结构的ZnO纳米材料已经被合成, 使得制造以ZnO为基础的纳米设备成为可能^[7-9]. 人们发现ZnO材料由于O空位和缺陷的存在可以显示磁性, 而且可以通过掺杂来提高磁矩^[10-12]. 已有研究表明用3d过渡金属掺杂ZnO可以使得材料具有室温铁磁性^[13,14]; 不仅如此, 由于磁性原子的3d态和p态具有强烈的耦合作用, 因而在室温下可以通过调节空穴浓度来调制材料的铁磁性. 但是

实际上这类材料的磁性很弱^[15-17]. 寻找磁性大且具有室温铁磁性的ZnO纳米材料成为当前ZnO基稀磁半导体研究的热点.

与3d过渡金属元素相比, 4f稀土元素不仅可以加大材料磁矩, 而且还可能加强其铁磁性^[18,19]. 理论表明, 磁性原子之间的铁磁性耦合可以通过非局域电子来调节, 例如s-f耦合^[20,21]. ZnO纳米材料具有大量的s态电子, 因此在ZnO纳米材料中掺杂4f稀土元素可大幅度提高材料的铁磁性. 钆(Gd)的4f电子层恰好半满, 因此Gd在镧系元素中具有最大的电子自旋总磁矩, 是较为理想的掺杂原子之一. 稀土元素掺杂ZnO纳米材料已经得到了广泛研究, 但是这些研究主要集中于材料的光学性质^[22], 磁性的研究非常少, 而且材料室温铁磁性的起源仍然备受争议^[23-25]. Shi等理论计算发现Gd掺杂ZnO体材料时系统显示铁磁性, 并且这种铁磁性可以通过添加电子来进行调控^[21]; 但是, Bantounas等却发现Gd掺杂ZnO显示反铁磁性^[23]. Dakhel等实验合成了显示铁磁性的Gd掺杂ZnO纳米晶, 他们认为材料的磁性来源于不完美

* 山东省高等学校科技计划项目(批准号: J13LA05)和山东省自然科学基金(批准号: ZR2014AM017)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: renjf@sdu.edu.cn

的掺杂^[24]. Ma 等实验上利用化学气象沉积工艺实验制备了 Gd 掺杂 ZnO 纤锌矿纳米线, 发现当掺杂浓度为 5% 时材料显示铁磁性^[25].

结构不同的 ZnO 纳米体系具有不同的磁性. 对由于大的表体比和量子限制效应而变得更为复杂的 ZnO 纳米结构, 如 ZnO 纳米线等, 从理论上研究稀土掺杂对其磁性的影响及其机理显得尤为重要. 在这篇文章中, 我们基于第一性原理计算了 Gd 掺杂 ZnO 纳米线的电学和磁学性质, 讨论了不同位置 Gd 掺杂及注入电子对体系磁性的影响及其原理.

2 理论方法

本文所有的计算都是用 VASP(Vienna ab initio Simulation Package) 实现的^[26]. VASP 利用第一性原理, 以密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)为基础, 原子间的交换作用用投影缀加平面波(Projector-Augmented Wave, PAW)方法来描述^[27,28], 电子间的交换关联能用广义梯度近似(Generalized-Gradient-Approximation, GGA)的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 来处理^[29]. 我们所研究的 ZnO 纳米线结构如图 1 所示, 是沿 ZnO 纤锌矿晶体 [0001] 方向切割而成, 与实验合成的 Gd 掺杂 ZnO 纳米线结构一致^[25]. 我们截取 4 层总共 96 个原子构成一个超胞, 并且设置 12 Å 的真空层来避免相邻纳米

线之间的相互作用. 截断能为 450 eV, 自治收敛精度为 1.0×10^{-4} eV, 力收敛判据为 0.02 eV/Å, K 点取值为 $1 \times 1 \times 7$.

3 结果与讨论

首先我们对未掺杂的 ZnO 体材料进行结构优化. 优化后的 ZnO 体材料的晶格常数为 $a = 3.29$ Å, $c = 5.29$ Å, 与其他理论计算值类似^[23], 接近于实验值 $a = 3.249$ Å, $c = 5.200$ Å^[30]. 沿优化好的 ZnO 体材料 [0001] 方向进行切割产生 ZnO 纳米线. 优化好的未掺杂的 ZnO 纳米线出现明显的表面重构现象, 如图 1 所示. 沿 Z 轴方向的晶格常数是 5.38 Å, 比体材料的略大, 这是因为纳米线可以在轴向得到更充分弛豫的缘故. 如前所述, 实验表明在纤锌矿 ZnO 纳米线中 Gd 原子取代了 Zn 的位置并且掺杂的浓度是 5% 时显示铁磁性^[25], 因此我们用两个 Gd 原子取代超胞中的两个 Zn 原子, 使掺杂浓度为 4.2%, 与实验值接近. Gd 原子可以替换不同位置的 Zn 原子从而形成不同的掺杂形式, 因此我们选取了六种代表性的不同掺杂位置来研究 Gd 掺杂对 ZnO 纳米线磁性的影响, 掺杂替换情况如图 2 所示, 为便于观察, I-V 给出体系的俯视图, VI 给出体系的侧视图. 图 2 中的 I, II, VI 这三种掺杂方式的特点是 Gd-Gd 原子掺杂位置比较远, III, IV, V 这三种掺杂方式的特点是两个 Gd 原子之间只隔了一个 O 原子, 掺杂原子之间的距离比较近.

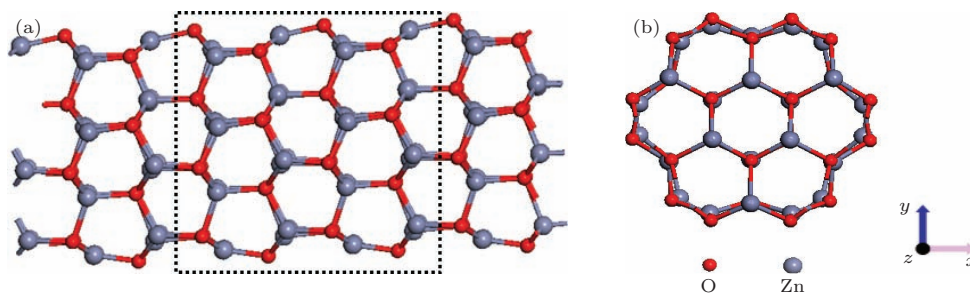


图 1 (网刊彩色) 优化后的 ZnO 纳米线结构图 (a) ZnO 纳米线侧视图; (b) ZnO 纳米线俯视图. 虚线选中的部分为计算选取的超胞, 一共 96 个原子, 包括 48 个 Zn 原子和 48 个 O 原子

Fig. 1. (color online) (a) Side view and (b) top view of the optimized ZnO nanowires. The dashed rectangle represents the supercell adopted in the calculations, which contains 96 atoms, composing of 48 Zn atoms and 48 O atoms.

对于不同的掺杂位置, 我们分别考虑了 $Gd_2Zn_{46}O_{48}$ 纳米线的铁磁耦合和反铁磁耦合, 计算了不同耦合态的能量差 ($\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$) 及形成能 E_f 以确定它们的稳定性, 结果如表 1 所示.

E_{AFM} , E_{FM} 分别表示反铁磁态和铁磁态时系统的能量. 计算时通过 VASP 的输入参数人为设置体系的初始磁耦合态为铁磁态和反铁磁态, 然后分别进行结构优化, 我们认为优化后能量较低的状态即为

体系应有的磁耦合态. 形成能 E_f 公式如下:

$$E_f = E_{\text{tot}} - E_{\text{pure}} + n(\mu_{\text{Zn}} - \mu_{\text{Gd}}), \quad (1)$$

式中, E_{tot} 是 $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{48}$ 纳米线的总能, E_{pure} 是未掺杂 ZnO 纳米线总能, n 是掺杂 Gd 原子个数, μ_{Zn} 和 μ_{Gd} 是 Zn 和 Gd 的化学势.

从表 1 中可以看出六种结构的形成能都是负值, 说明 $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{48}$ 纳米线的状态比较稳定, 因而 Gd 原子掺杂 ZnO 纳米线在实验上容易实现. 同时还可以从表中看出图 2 中掺杂的两个 Gd 原子离

得到比较近的三种状态 III, IV, V 显示铁磁性, 而且结构 III 的纳米线的形成能在显示铁磁性的结构中最低, 表明其稳定性最好. 结构 VI 也显示铁磁性, 但是其形成能最高. 掺杂的两个 Gd 原子离的比较远的两种结构 I 和 II 显示反铁磁性, 且结构 I 的形成能比结构 II 更低, 说明结构 I 更加稳定. 以上结果说明掺杂后临近的 Gd 原子相互作用, 更容易使体系显示铁磁性, 并且当 Gd 原子掺杂在同层 Zn 中时稳定性更好.

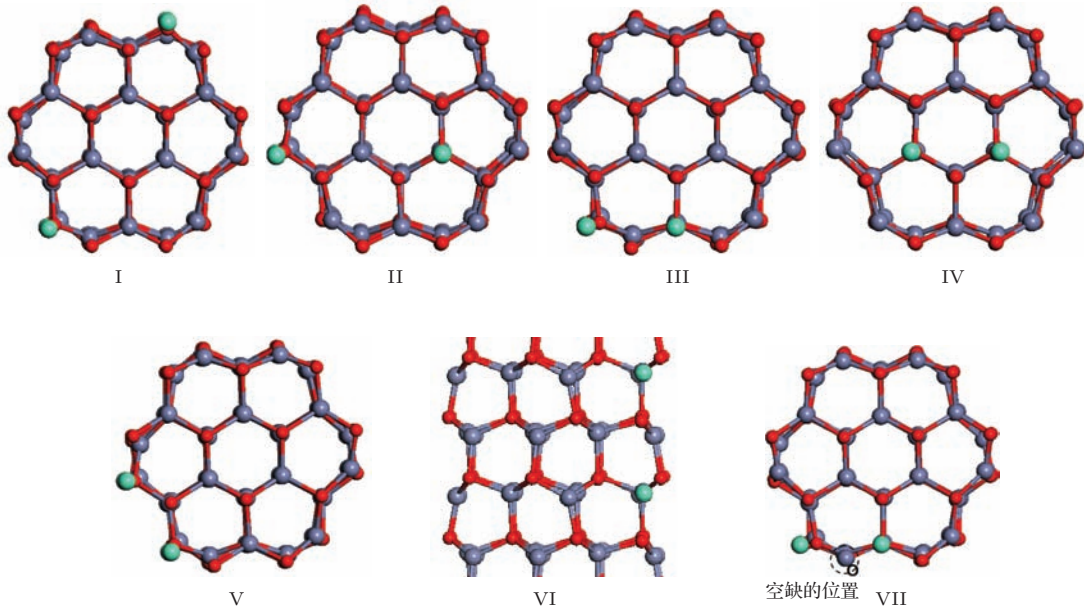


图 2 (网刊彩色) 六种不同掺杂位置及包含 O 空位的 Gd 掺杂 ZnO 纳米线优化后的结构图

Fig. 2. (color online) (I)-(VI) Six different configurations of the optimized Gd-doped ZnO nanowires and (VII) the Gd-doped ZnO nanowires with one oxygen vacancy.

表 1 $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{48}$ 和 $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{47}$ 纳米线的磁耦合态及形成能

Table 1. The magnetic coupling states and forming energies of the $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{48}$ and $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{47}$ nanowires.

掺杂类型	I	II	III	IV	V	VI	VII
磁有序态	AFM	AFM	FM	FM	FM	FM	AFM
E_f/eV	-9.223	-9.203	-9.171	-8.981	-8.791	-8.781	-0.73

表 2 结构 III 中不同带电态的铁磁和反铁磁耦合之间的能量差 ΔE 及形成能 E_f

Table 2. The energy difference ΔE between FM and AFM states, as well as the forming energies E_f of configuration III with different electron charges.

电荷数	0.5 e	1.0 e	1.5 e	2.0 e	0.5 h	1.0 h	1.5 h	2.0 h	O 空位
$\Delta E/\text{meV}$	2	160	20	-12	-3	-10	-8	-51	-17
E_f/eV	-10.162	-10.931	-11.703	-12.323	-7.967	-5.527	-4.867	-3.036	-0.73

虽然我们的理论计算结果说明 $\text{Gd}_2\text{Zn}_{46}\text{O}_{48}$ 纳米线可以显示铁磁性, 但是系统的 ΔE 很小, 同时不同掺杂态的形成能之间的差别比较小, 因此铁

磁性并不稳定, 所以实验室上制备的 Gd 掺杂 ZnO 很容易显示反铁磁性. Ungureanu 等发现在实验中可通过引入 Al 来控制系统的铁磁性^[29]. 引入 Al

为n型掺杂, 掺杂Al就会引入电子, 这说明引入一定的杂质、电子或者空穴可能会对系统的铁磁性有影响, 这些也已经在其他的理论研究中得到了证明^[21]. 在这里我们选取显示铁磁性且结构相对稳定的结构III作为例子研究在Gd₂Zn₄₆O₄₈纳米线中加入电子或者空穴对体系磁性的影响. 我们在Gd₂Zn₄₆O₄₈纳米线超胞中注入不同数目的电子、空穴数, 分别计算了系统的 ΔE , 结果如表2所示. 当1个电子被加入超胞时系统铁磁的稳定性被明显加强, 此时不同磁耦合态的纳米线结构的能量差达到 $\Delta E = 160$ meV, 远高于未注入电子时的能量差 $\Delta E = 2$ meV. 当掺入的电子数达到2个时, 体系显示反铁磁性, 表明当掺入浓度比较大时, Gd₂Zn₄₆O₄₈纳米线显示反铁磁性. 同时我们发现, 在Gd₂Zn₄₆O₄₈纳米线体系中加入空穴只能使得系统由铁磁性变成反铁磁性. 4f电子局域性强, 不能直接发生耦合作用, 而s电子是非局域的, 4f和s电子可以耦合, 极化的s电子影响f电子的自旋方向, 所以s电子在磁性交换耦合作用时起着重要作用, 因此加入电子可以得到更加稳定的铁磁性. 对于铁磁耦合, f-s耦合比f-f耦合、f-d耦合更为重要. 我们同时也计算了Gd₂Zn₄₆O₄₈纳米线体系加入电子、空穴后的形成能, 计算结果如表2所示. 加入电子后体系的形成能降低, 并且随着加入的电子数的增大而降低, 说明加入电子后体系结构变的更加稳定. 系统形成能随着加入空穴量的增加而增大, 说明系统的稳定性降低. 以上结果说明实验中可以通过掺杂注入电子的方式来调节系统的磁耦合状态.

本征缺陷对于系统磁性的影响也很重要, 因此我们研究了当存在O空位时Gd原子之间的磁性耦合. O空位的位置在两个Gd原子之间, 如图2 VII所示. 一个O空位引入两个电子, 此时的能量差为 $\Delta E = -17$ meV, 系统显示的是反铁磁性. O空位对体系的影响类似于在体系中加入2.0 e的电荷. O空位的出现并没有使得系统铁磁性的稳定性得到增加, 这是因为O空位引入电子数目比较大的缘故. 以上结果说明我们可以通过调节加入的电子数目来调节Gd掺杂ZnO纳米线的磁性, 这与Gd掺杂ZnO体材料的情况是类似的^[21].

为进一步分析Gd₂Zn₄₆O₄₈体系的磁性质, 我们给出了注入1.0个电子后结构III的自旋密度分布图及分波态密度图PDOS(Partial Density of States), 如图3所示, 其中自旋密度定义为

$\Delta\rho = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$, ρ_{\uparrow} 为自旋向上电荷密度, ρ_{\downarrow} 为自旋向下电荷密度. 由图3(a)可以看出, 磁性主要来源于两个掺杂的Gd原子, 每个Gd原子的磁矩大约是7 μ_B , Zn和O原子对磁矩的贡献很小. 从图中还可以看出, 距离Gd原子比较近的O原子被极化, 并且磁矩为负值, 并且处于两个Gd原子之间的O原子的磁矩最大为-0.018 μ_B . 计算还发现, 未注入电子时, Zn原子的磁矩很小但是为正值, 随着注入的电子数目增多, Zn原子磁矩变为负值, 且磁矩数值上有微弱的增大, 但是O的磁矩几乎保持不变. 图3(b)给出了分波态密度图, 三个代表性原子为图3(a)中最下面的Gd原子, 两个Gd原子之间的O原子以及和这个O原子相连的最近邻的Zn原子. 从图中可以看出, 体系的磁性主要来源于Gd原子的f轨道, 被极化的O的磁性主要来源于p轨道. 在价带顶Gd的f轨道和O的p轨道出现杂化, 导致两个Gd原子之间可以通过没有磁性的O原子发生超交换作用, 使得体系容易显示反铁磁性. 从图中还可以看出, 导带底Zn原子及O原子的s轨道和Gd原子的f轨道出现杂化, 说明s-f耦合对于该体系的铁磁稳定性很重要.

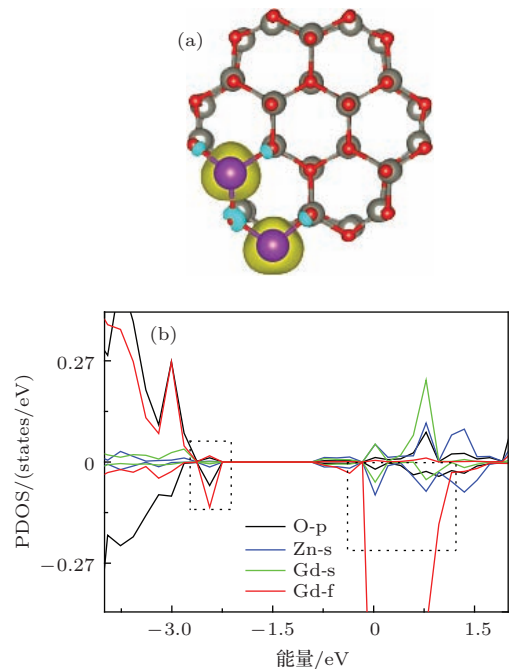


图3 (网刊彩色)(a)注入1.0个电子后结构III的自旋密度图($\Delta\rho = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$), 黄色代表 $\Delta\rho > 0$, 蓝色代表 $\Delta\rho < 0$; (b)分波态密度图
Fig. 3. (a) The spin density ($\Delta\rho = \rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}$) of configuration III with one extra electron. The yellow means $\Delta\rho > 0$, while the blue means $\Delta\rho < 0$; (b) projected density of states.

4 结 论

在第一性原理基础上计算了两个 Gd 原子取代 Zn 原子后 ZnO 纳米线的电学性质和磁学性质. 讨论了两个 Gd 原子掺杂位置不同对体系磁耦合状态及形成能的影响. 通过计算发现当掺杂的两个 Gd 原子距离很近时它们之间的耦合作用为铁磁性耦合, 同时发现通过在体系中加入电子可以明显的加强系统的铁磁性. 导带底 Zn 原子及 O 原子的 s 轨道和 Gd 原子的 f 轨道出现杂化, 说明 s-f 耦合对于 Gd 掺杂 ZnO 纳米线体系的铁磁稳定性很重要.

参考文献

- [1] Dietl T 2010 *Nat. Mater.* **9** 965
- [2] Lin W X, Weng Z Z, Zhang J M, Huang Z G 2011 *Chin. Phys. B* **20** 027103
- [3] Yi J B, Lim C C, Xing G Z, Fan H M, Van L H, Huang S L, Yang K S, Huang X L, Qin X B, Wang B Y, Wu T, Wang L, Zhang H T, Gao X Y, Liu T, Wee A T, Feng Y P, Ding J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 137201
- [4] Zheng Y 2013 *Appl. Phys. A* **112** 241
- [5] Sato K, Bergqvist L, Kudrnovský J, Dederichs P H, Eriksson O, Turek I, Sanyal B, Bouzerar G, Katayama-Yoshida H, Dinh V A, Fukushima T, Kizaki H, Zeller R 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1633
- [6] Lu Y B, Dai Y, Guo M, Yu L, Huang B 2013 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15** 5208
- [7] Chen R, Ye Q L, He T, Ta V D, Ying Y, Tay Y Y, Wu T, Sun H 2013 *Nano. Lett.* **13** 734
- [8] Segura-Ruiz J, Martinez-Criado G, Chu M H, Geburt S, Ronning C 2011 *Nano Lett.* **11** 5322
- [9] Chen Q, Wang J L 2009 *Chem. Phys. Lett.* **474** 336
- [10] Banerjee S, Mandal M, Gayathrib N, Sardar M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 182501
- [11] Hong N H, Sakai J, Brize V 2007 *J. Phys.: Condens. Mater.* **19** 036219
- [12] Xu Q, Schmidt H, Zhou S Q, Potzger K, Helm M, Hochmuth H, Lorenz M, Setzer A, Esquinazi P, Meinelcke C, Grundmann M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 082508
- [13] Dietl T, Ohno H, Matsukura F 2011 *Phys. Rev. B* **63** 195205
- [14] Sain S, Bhattacharjee J, Mukherjee M, Das D, Pradhan S K 2012 *J. Alloys Compd.* **519** 112
- [15] Chikoidze E, Boshta M, Sayed M H, Dumont Y 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 043713
- [16] Zhang F C, Dong J T, Zhang W H, Zhang Z Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 027503
- [17] Guptam M K, Kumar B 2011 *J. Mater. Chem.* **10** 1039
- [18] Kumar S, Sahare P D 2012 *J. Rare Earths* **30** 761
- [19] El Hachimi A G, Zaari H, Benyoussef A, El Yadari M, El Kenz A 2014 *J. Rare Earths* **32** 715
- [20] Dalpian G M, Wei S H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 115201
- [21] Shi H L, Zhang P, Li S S, Xia J B 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 023910
- [22] Yang Y H, Feng Y P, Zhu H G, Yang G W 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 053502
- [23] Bantouna I, Goumri-Said S, Kanoun M B, Manchon A, Roqan I, Schwingenschlög U 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 083929
- [24] Dakhel A A, El-Hilo M 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 123905
- [25] Ma X Y 2012 *Thin Solid Films* **520** 5752
- [26] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [27] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [28] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [29] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [30] Kisi E H, Elcombe M M 1989 *Acta Cryst. C: Cryst. Struct. Commun.* **45** 1867
- [31] Ungureanu M, Schmidt H, Wenckstern H V, Hochmuth H, Lorenz M, Grundmann M, Fecioru-Morariu M, Güntherodt G 2007 *Thin Solid Films* **515** 8761

Magnetic coupling properties of Gd-doped ZnO nanowires studied by first-principles calculations*

Zhang Yan-Ru Zhang Lin Ren Jun-Feng[†] Yuan Xiao-Bo Hu Gui-Chao

(College of Physics and Electronics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China)

(Received 11 February 2015; revised manuscript received 24 April 2015)

Abstract

Magnetic coupling properties of Gd-doped ZnO nanowires are studied theoretically by using first-principles calculations. Several positions of Zn atoms that may be substituted by Gd atoms in ZnO nanowires are discussed. Numerical results show that the magnetic coupling is ferromagnetic when the two Gd atoms doped in ZnO nanowires are near each other. Injection of suitable amount of electrons can enforce these ferromagnetic properties in Gd-doped ZnO nanowires. It is also found that s-f coupling becomes remarkable when the Gd atoms are doped in ZnO nanowires, making the ferromagnetic coupling state more stable than the anti-ferromagnetic coupling state, and this is also the mechanism to elucidate the origination of ferromagnetic state in Gd-doped ZnO nanowires in experiments. These results will give a theoretical support for those who found experimentally that Gd-doped ZnO nanowires show ferromagnetic properties.

Keywords: Gd-doped ZnO nanowire, magnetic coupling, first-principles calculations

PACS: 81.07.Gf, 75.75.-c, 31.15.A-

DOI: [10.7498/aps.64.178103](https://doi.org/10.7498/aps.64.178103)

* Project supported by the Shandong Province Higher Educational Science and Technology Program, China (Grant No. J13LA05) and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR2014AM017).

[†] Corresponding author. E-mail: renjf@sdsu.edu.cn