

Al 掺杂 6H-SiC 的磁性研究与理论计算

黄毅华 江东亮 张辉 陈忠明 黄政仁

Ferromagnetism of Al-doped 6H-SiC and theoretical calculation

Huang Yi-Hua Jiang Dong-Liang Zhang Hui Chen Zhong-Ming Huang Zheng-Ren

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 017501 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.017501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.017501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于时空变换恒定磁化的起始磁化曲线推算方法

A calculation method for initial magnetization curve under constant magnetization based on time-space transformation

物理学报.2015, 64(23): 237503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.237503>

Ga 空位对 GaN:Gd 体系磁性影响的第一性原理研究

Effect of Ga vacancy on the magnetism in GaN:Gd: First-principles calculation

物理学报.2016, 65(12): 127102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.127102>

强激光照射对 6H-SiC 晶体电子特性的影响

Effect of intense laser irradiation on the electronic properties of 6H-SiC

物理学报.2016, 65(10): 107101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.107101>

CoTiSb 基体中 Ni 元素诱导的单自旋通道研究

Single spin channels in Ni-doped CoTiSb semiconductor

物理学报.2016, 65(8): 087102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.087102>

Mg-Y-Zn 合金三元金属间化合物的电子结构及其相稳定性的第一性原理研究

First-principles study of electronic structures and phase stabilities of ternary intermetallic compounds in the Mg-Y-Zn alloys

物理学报.2015, 64(18): 187102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.187102>

Al掺杂6H-SiC的磁性研究与理论计算*

黄毅华[†] 江东亮 张辉 陈忠明 黄政仁

(中国科学院上海硅酸盐研究所结构中心、高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室, 上海 200050)

(2016年7月19日收到; 2016年9月29日收到修改稿)

d^0 铁磁性 SiC 被认为是自旋电子学领域的关键材料之一, 受到广泛关注. 本文采用氩气气氛保护的共烧掺杂方法制备具有 d^0 铁磁性的 Al 掺杂 6H-SiC 粉体. 氩气气氛能有效抑制 SiC 在高温下的分解, 保护 Al 的有效掺入. 所制备的粉体磁滞回线明显, 矫顽力大, 饱和磁矩达到 0.07 emu/g. 随着煅烧温度的升高, 粉体从原来的抗磁性逐渐转变为铁磁性, 当温度进一步升高至 2200 °C 以上时, 粉体重新表现为抗磁性. 采用第一性原理计算了其磁性的来源, 并分析其净自旋在正空间中的分布情况. 计算表明, Al 原子与空位的共同作用产生了 $1.0 \mu_B$ 的局域磁矩, 且其在 c 轴方向具有较稳定磁耦合作用. Al 掺杂 6H-SiC 粉体的磁性主要来自于 C 原子的 p 轨道电子.

关键词: d^0 铁磁性, SiC, 高温掺杂

PACS: 75.60.Ej, 71.20.-b, 75.75.Cd

DOI: 10.7498/aps.66.017501

1 引言

d^0 铁磁性是 2005 年爱尔兰科学家 Coey 在综述^[1]其连续 4 年在《Nature》发表的 3 篇论文^[2-4]等工作时提出的一个概念, 即在 d 轨道和 f 轨道没有不成对电子的情况下, 材料(如石墨、 CaB_6 和 HfO_2 等)具有铁磁性和高于室温居里温度的一种性能. 一直以来, 铁磁性都是 Fe, Co, Ni 等不成对 d 电子元素和稀土等不成对 f 电子元素所专有的性能. Coey 认为是晶格或键缺陷的存在导致了杂带 (impurity band) 出现, 并产生自旋极化. 电子自发或受缺陷影响进入杂带, 产生自旋不对称, 从而产生 d^0 铁磁性. 目前这一概念和现象已被凝聚态物理领域广泛接受并证实. Garcia 等^[5]在《Nano Letters》上报道: 采用有机分子覆盖的方法, 改变纳米 ZnO 颗粒的电子结构, 使其具有非 d 电子参与的铁磁性. 利用 X 射线吸收近边结构谱 (XANES) 和光致发光谱 (PL spectra) 表征了其电子结构的改

变情况. 他们称: 证实这种产生磁性的电子结构是一个惊喜的挑战, 这种挑战将可能开启使用这些材料的新世界. 近年来相关稀磁半导体 d^0 铁磁性的研究成为热点, Ando^[6]在《Science》上报道: 赋予半导体磁性就是在原来“电荷通和断”的维度上增加具有记忆功能的“自旋上和下”两个维度, 自旋电子学可能对计算机信息等领域产生变革性的影响.

作为新一代的半导体材料, SiC 的 d^0 铁磁性也在近年受到国内外众多学者的关注. 诱导 SiC 产生 d^0 铁磁性的方法目前主要有两种. 一种是通过中子辐照或离子轰击的方法使 SiC 内部产生空位缺陷, 从而产生 d^0 铁磁性^[7-9]. 北京凝聚态物理国家实验室的 Liu 等^[7]报道: 采用中子辐照的方法制备了磁性可控的 6H-SiC 单晶, 其居里温度高于室温; 随着中子辐照剂量的增加, SiC 从原来的抗磁性逐渐转变为铁磁性(具有磁滞回线). 但是, 其磁滞现象不明显, 矫顽力较小. 另一种诱导 SiC 产生 d^0 铁磁性的方法是引入杂质缺陷, 如 Al, Zn,

* 国家自然科学基金 (批准号: 51572276)、国家自然科学基金委员会-广东省人民政府联合基金 (第二期) 超级计算科学应用研究专项和高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室计算材料创新项目 (批准号: Y12ZC4120G) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: wyyu@mail.sic.ac.cn

Mn, Cu 等^[10-14]. Song 等^[10]报道: 少量 Al 的掺入 (0.75 at%) 即可使 4 H-SiC 产生居里温度高于室温的 d^0 铁磁性. 但是这种方法制备的 SiC 粉体纯度不高, 只适合少量制备, 并且没有具体说明 Al 掺杂 SiC 磁性的来源以及磁耦合作用.

本文采用氩气保护的高温共烧方法制备了 Al 掺杂 SiC 磁性粉体, 其纯度高、磁滞回线明显、饱和磁矩大; 并且通过第一性原理计算分析了 Al 掺杂 6H-SiC 的磁性来源、自旋分布和其磁耦合作用.

2 实验与计算模型

2.1 Al 掺杂 SiC 粉体的实验制备

将一定量 Al_2O_3 粉体与高纯 SiC 粉体进行球磨混合 (原子 Al : Si : C = 1 : 49.5 : 49.5), 干燥后将混合粉体置于碳管炉中高温煅烧. 在此过程中, 800 °C 以下为真空状态, 800 °C 以后通入高纯氩气 (Ar) 进行保护, 煅烧温度分别为 1800, 2000 和 2200 °C, 保温 30 min.

2.2 表征

采用 X 射线衍射仪测量粉体的组分、含量; 采用拉曼光谱仪 (Raman) 测试粉体的组分与分解情况; 采用扫描电子显微镜 (SEM) 观察粉体的微观形貌, 采用能谱仪 (EDS) 分析元素含量; 采用磁性测试系统研究粉体的磁滞回线、饱和磁矩等; 采用辉光放电质谱 (GDMS) 测试 Fe, Co, Ni 的元素含量.

2.3 模型构建

6H-SiC 晶体属于空间群 $P6_3mc$, 晶格常数是 $a = b = 3.081 \text{ \AA}$, $c = 15.124 \text{ \AA}$. SiC 中 C 的外层电子排布是 $2s^2 2p^2$; Si 的外层电子排布是 $3s^2 3p^2$. 两者都没有 d 和 f 轨道. SiC 晶体中每一个原子轨道都采取 sp^3 的方式杂化, 形成强四面体基本结构单元, 并有一定程度极化. C 原子的每个杂化轨道与 Si 原子的每个杂化轨道部分重叠并共用一对电子, 无不成对电子存在. 本文 6H-SiC 的计算模型采用的是一个包含 108 个原子的 $3 \times 3 \times 1$ 的超晶胞, 如图 1 所示. 其中的缺陷在于有一个 Al (红色) 取代了 Si, 且在上邻位存在一个相应的 V_{Si} , 空位周围的

3 个 C 原子的初始自旋在计算过程中进行设定, Al 原子的掺杂比例为 0.93%.

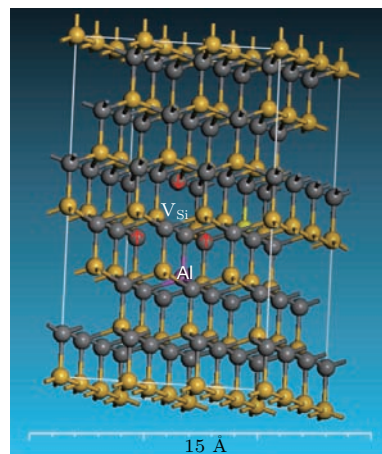


图 1 (网刊彩色) Al 掺杂 SiC 缺陷结构示意图, 其中黄色的为 Si 原子、灰色的为 C 原子、红色的为 Al 原子, 上下箭头表示计算过程中给定邻近 C 原子的初始自旋

Fig. 1. (color online) Sketch of defects in the supercell of $3 \times 3 \times 1$ 6H-SiC, in which one Si (yellow ball) atom is replaced with one Al (red ball) atom, one Si atom is replaced with Vacancy, and all C (gray ball) atoms remain in the same in defects.

2.4 计算方法

计算选用 CASTEP7. 软件包完成. 离子和电子之间的相互交换关联能采用密度泛函理论 (DFT) 广义梯度近似 (GGA), 采用的赝势是超软赝势, 体系平面波截断能取 280 eV, 布里渊区分割特殊点采用 Monkhorst-Pack 方案, 采用是 $2 \times 2 \times 1$ 的特殊 K 点对布里渊区求和, 自洽场的收敛精度设为 $2 \times 10^{-6} \text{ eV}$, 作用在每个原子上的力最大收敛精度 $0.1 \text{ eV/\AA}$, 能量计算在倒空间中进行, 先优化晶胞的结构, 得到晶胞参数后, 再对坐标进行优化, 在此基础上计算单点能.

3 实验结果与讨论

图 2 是 Al 掺杂 SiC 经过 2000 °C 煅烧后测得的 X 射线衍射 (XRD) 图谱. 从图中可以发现, 主要的衍射峰来自于 6H-SiC, 但是由于高温相转变的原因, 出现 3R-SiC 和 4H-SiC 的弱衍射峰, 在 78.3° 处有一个疑似 Al_4C_3 的弱峰. 其中, 所有 6H-SiC 峰所对应的衍射角与 PDF 标准卡片相比都发生右移 0.03° 的现象. 标准卡片中, 6H-SiC 的 a 和 b 值等于 $3.081 \text{ \AA}$, c 值为 $15.124 \text{ \AA}$. 而根据所测得的 XRD 图

谱计算, 发现其 a 和 b 值为 $3.075 \text{ \AA}$, c 值为 $15.09 \text{ \AA}$. 根据布拉格公式可以知道, 其晶胞结构发生变化, 其原因可能是Al的掺入导致晶格畸变所致. 由此, 说明煅烧后粉体的主相依然是6H-SiC, 而掺入的Al很可能已部分进入6H-SiC的晶胞.

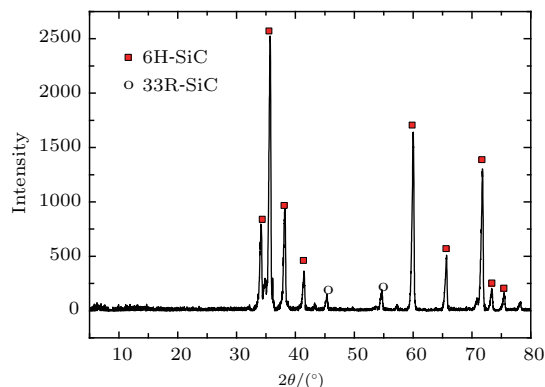


图2 Al掺杂SiC经过 2000°C 氩气保护煅烧后的XRD图谱

Fig. 2. XRD pattern of Al : SiC powder after calcination at 2200°C in Ar protection.

由于大量的文献报道显示碳材料如石墨、石墨烯等都有可能产生 d^0 铁磁性^[15], 而在SiC的高温煅烧过程中, 由于Si的分解挥发极有可能在SiC表面造成石墨残留. 为了区别其磁性来源的主相, 分别做了有无氩气气氛保护的Al掺杂SiC实验, 其Raman图谱如图3所示. 图3(a)是有氩气气氛保护的粉体Raman图谱, 从图中可以看出, 拉曼峰有两个, 分别在 784 和 966 cm^{-1} 处, 这两个峰分别对应SiC的横光学和纵光学特征振动, 但也出现了少量微弱的类C的G峰, 表明在氩气气氛保护下, SiC未发生明显分解. 而在图3(b)中, SiC的特征振动峰较弱, 反而石墨的缺陷D峰(1335 cm^{-1})、面内振动G峰(1570 cm^{-1})和面间振动2D峰(2690 cm^{-1})的强度都较大. 进一步的元素分析也表明在无氩气气氛保护的情况下, Al掺杂SiC粉体发生分解. 而有氩气保护的Al掺杂SiC粉体即使在 2200°C 高温下煅烧依然具有明显的SiC特征峰, 并保持良好的形貌特征(如图4所示). 从图4中可以看出, SiC颗粒表面圆滑, 尺寸在 $3 \mu\text{m}$ 左右, 颗粒与颗粒的颈部发生部分黏连现象. 如果SiC发生分解, 其表面由于Si的挥发, 残余的C会自发组成片层状石墨, 而变得粗糙; 此外, 其颗粒尺寸与初始粉体尺寸一致; 因此证明有氩气保护时, Al掺杂SiC不发生明显分解, 其后续的 d^0 铁磁性均来自于SiC相.

Al掺杂SiC粉体的能谱(EDS)结果(图5)进一步表明: 有氩气保护时, 粉体在 2200°C 高温下煅烧而不发生明显分解, 其C, Si比为 $49.53 : 49.51$; Al的原子比为 $0.96 \text{ at\%}$, 与加入量相当; 除C, Si, Al外, 未检出其他元素的存在. 虽然C含量略多, 与图3(a)出现的类碳G峰相对应, 但是绝大部分SiC没有分解, 而Al经过 2200°C 高温极少可能以单质存在, 结合XRD分析(图2), 推测Al已多数进入SiC晶格, 浓度为 $0.96 \text{ at\%}$.

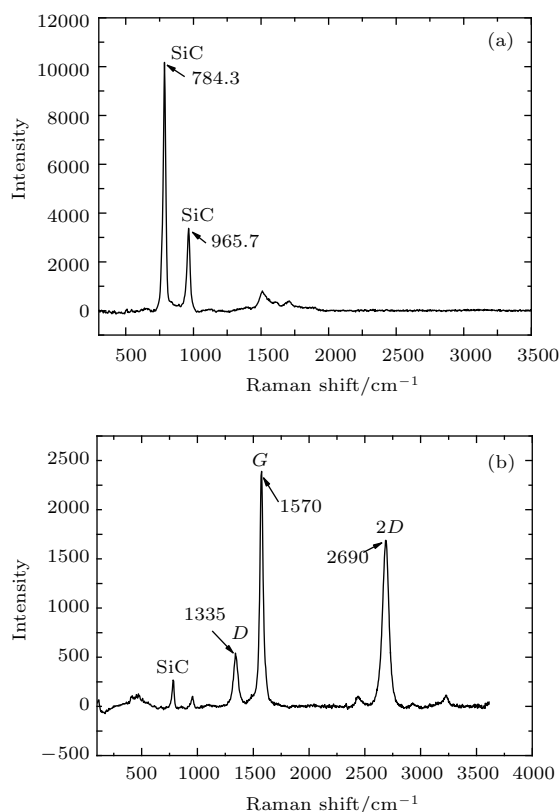


图3 有无氩气保护高温煅烧所得的Al掺杂SiC粉体的Raman图谱

Fig. 3. Raman spectra of Al : SiC powder after calcination with (a) and without (b) Ar protection.

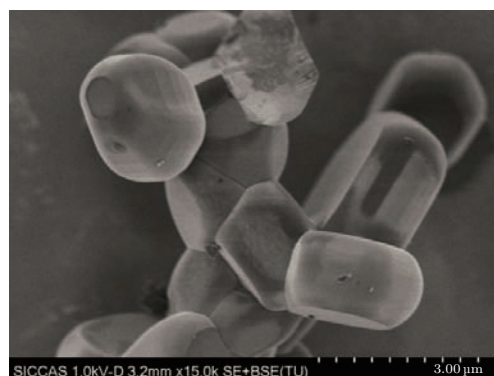


图4 Al掺杂SiC粉体的微观形貌

Fig. 4. Microstructure of Al : SiC powder.

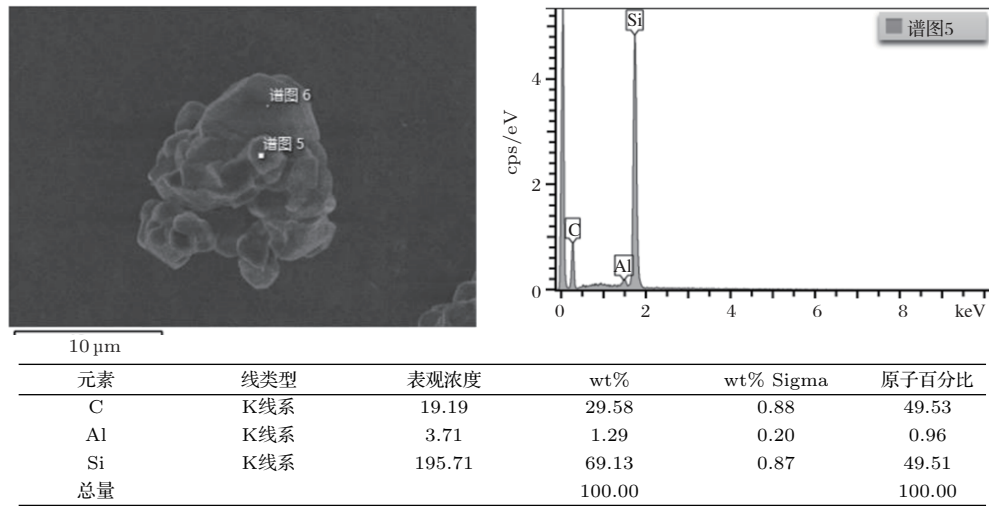


图5 Al掺杂SiC粉体的能谱分析

Fig. 5. EDS results of Al:SiC powder.

图6是氩气保护下的Al掺杂SiC粉体的磁化曲线,其煅烧温度分别为0, 1800, 2000和2200 °C.从图5中可以发现,未煅烧的Al混合SiC粉体表现为抗磁性,与纯SiC的磁化曲线类似,随着磁化强度的增加产生反向的磁性.但是经过1800 °C高温煅烧后,材料表现为铁磁性,其饱和磁矩达到0.07 emu/g;经过2000 °C高温煅烧后,材料的磁滞回线更为明显,矫顽力大,饱和磁矩达到0.012 emu/g;但是经过2200 °C煅烧后,材料又表现为抗磁性.这种消磁现象与文献[16]报道的ZnO

的高温消磁现象一致,原因是高温下原有的缺陷结构被破坏,而这些缺陷正是磁性的来源,所以会表现为没有磁性.按照0.96 at%Al全部固溶进入SiC晶格,那么每一个Al原子贡献的磁矩为0.08 μ_B .由于Fe, Co, Ni的掺入会极大地影响材料的磁性,于是采用GDMS测试其含量,发现均低于5 ppm;根据文献报道,这么低的含量只能产生 10^{-5} emu/g数量级的饱和磁矩[17],因此不可能对实验结果产生干扰,所以推断本实验中的磁性主要由Al掺杂SiC所导致.

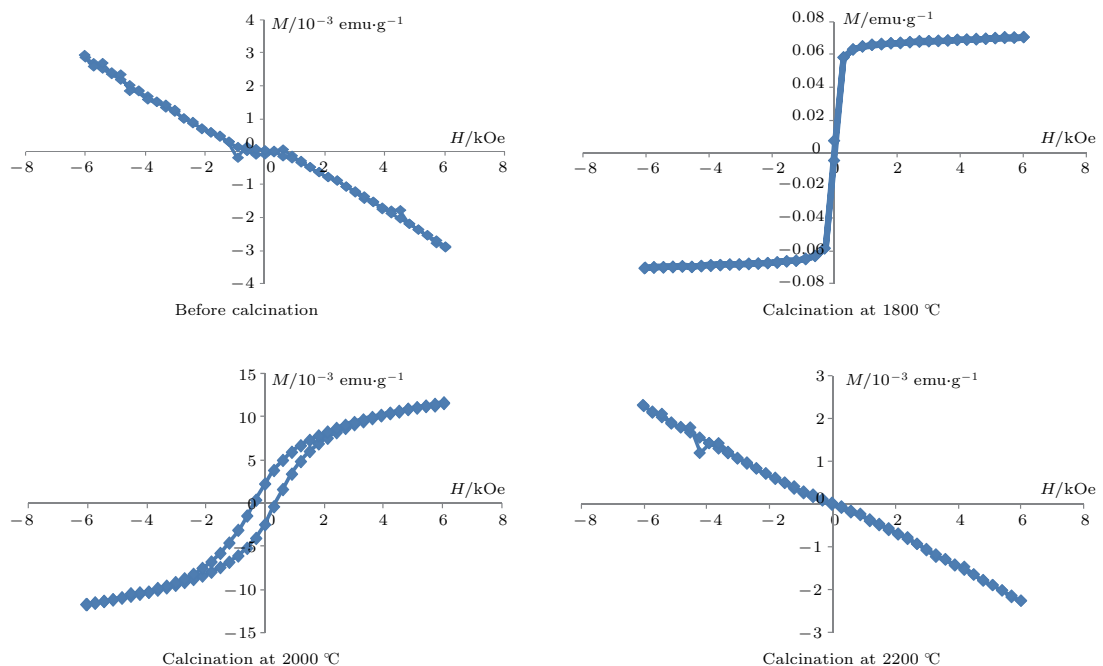


图6 氩气保护下不同温度煅烧的Al掺杂SiC粉体的磁化曲线

Fig. 6. Magnetization curves of Al:SiC powder calcinated at different temperature at Ar protection.

为了解释 Al 掺杂 6H-SiC 的磁性来源, 采用第一性原理进行分析. 由于本征的缺陷对磁性无贡献^[18], 计算表明 Al 固溶后更倾向于取代 Si 位, 那么磁性的来源必然是 Al_{Si} 或者其与其他缺陷共同作用产生的. 根据计算发现, Al_{Si} 单独或者与 V_{C} 共同作用并不产生磁矩. 而 Al_{Si} 与 V_{Si} 共同作用时, 产生 $1.0 \mu_{\text{B}}$ 的磁矩.

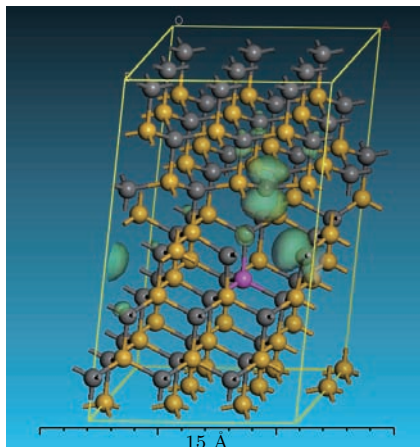


图7 (网刊彩色) 正空间的自旋分布图
Fig. 7. (color online) Spin distribution map at real space.

如图1所示, 当 Al_{Si} 与 V_{Si} 共同作用时, 优化后, 其 V_{Si} 几何结构为 C_{3v} 对称. Al 有 3 个价电子, 固溶后倾向于从空位上俘获一个电子, V_{Si} 处的电子结构为 $a_1^2 a_2^1 e^0$ (a_1, a_2, e 是 C_{3v} 对称下的分子轨道, a 为单态, e 为双态). 如果体系具有局域磁性, 其自旋磁矩应该为 $1(\uparrow\downarrow)$ 或 $3(\uparrow\uparrow)$. 分别计算了初始自旋为 1, 2, 3, 4 以及自旋不极化时的体系能量, 发现当初始自旋为 1 时, 体系能量最低, 其自旋极化能 $\Delta E_{\text{sp}} = 130 \text{ meV}$, 远大于室温稳定所需的能量 RT ($\approx 25.9 \text{ meV}$). 为了进一步研究晶格场对局域磁矩的作用, 我们设定 V_{Si} 周围的其余 3 个 C 原子的初始自旋分别为 $\uparrow\uparrow\downarrow$ (如图1所示), 经计算, 其局域磁矩仍保持为 $1.0 \mu_{\text{B}}$. 从自旋等密度面图6可以看出 (等密度面为 $0.02 \text{ e}/\text{\AA}^3$) 其自旋贡献主要来自于空位附近的 C 原子, 次邻近的 C 原子上也有一定磁矩产生. 而 Al 原子周围没有自旋分布, 说明 Al 原子本身对磁矩没有贡献. Al^{-1} 与 $\text{V}_{\text{Si}}^{+1}$ 由于静电作用使空位周围的晶体场产生畸变, 缺陷能级在晶场的作用下产生自旋劈裂, 导致了磁矩的产生. 而上下自旋电子态密度 (图8(a)) 也表明在费

米面处自旋上下电子的密度不相等, 上自旋密度为 $3.95 \text{ electrons/eV}$, 而下自旋为 $3.15 \text{ electrons/eV}$, 因而在费米面处有净磁矩的产生; 从分波自旋积分图8(b)中可以看出, 在费米面处磁矩主要来源于原子的 p 轨道, 结合图7可以知道主要来源是 C 原子的 p 轨道. 这点与 Zn 掺杂以及中子辐照所得的 SiC 磁性来源一致^[14,19], 都是 C 原子的 p 电子贡献局域磁矩.

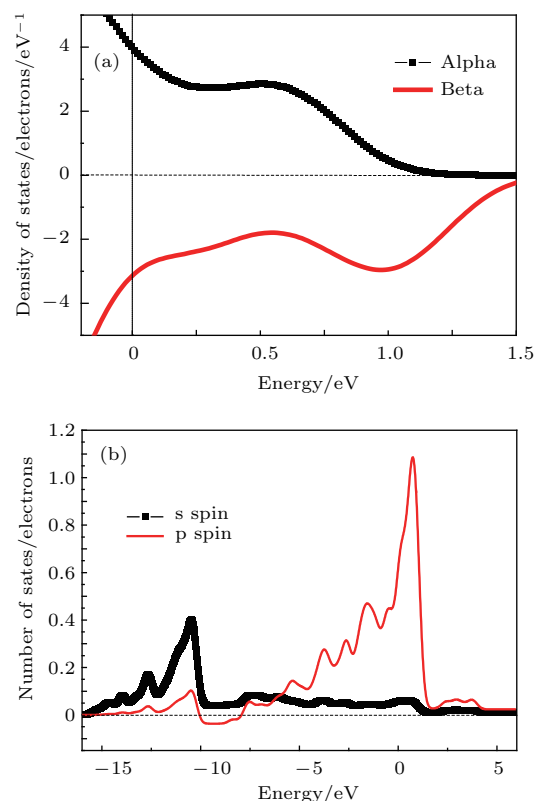


图8 (网刊彩色) 上下自旋电子态密度 (a) 和分波自旋积分图 (b)

Fig. 8. (color online) Spin-resolved DOS (a) and partial integrated spin density of state, blue line is s orbit electrons and red line is p orbit electrons (b).

为了研究磁性的耦合作用, 将原有超晶胞沿 c 轴或 a 轴扩展一倍, 组成一个具有 216 个原子的超晶胞 (如图9所示). c 轴扩大一倍后, 晶胞尺寸为 $a = b = 9.24 \text{ \AA}$, $c = 30.248 \text{ \AA}$, a 轴扩大一倍后, $a = 18.486 \text{ \AA}$, $b = 9.234 \text{ \AA}$, $c = 15.124 \text{ \AA}$. 设定初始自旋计算两种磁结构优化的总能量 E_{AFM} (反铁磁态) 和 E_{FM} (铁磁态). 计算结果表明铁磁态的能量比反铁磁态能量分别低 10 meV (a 轴) 或 195 meV (c 轴). 表明体系具有一定的铁磁耦合作用, 且在 c 轴方向的磁性耦合作用比较明显.

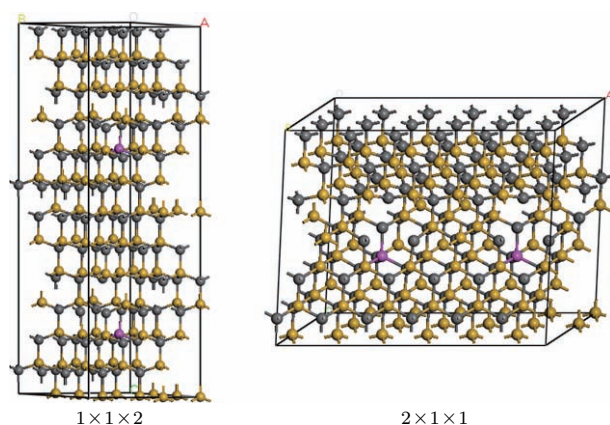


图9 (网刊彩色) 超晶胞耦合示意图

Fig. 9. (color online) Sketch of coupling supercell.

4 结 论

本文利用氩气保护高温煅烧的方法, 制备了具有磁性的Al掺杂6H-SiC粉体. 粉体结晶性能良好, 磁滞回线明显, 饱和磁矩达到0.07 emu/g, 具有高温消磁的特性; 另外, 采用第一性原理计算, 发现Al的掺入导致了磁矩的产生, 每个晶胞产生 $1.0 \mu_B$ 局域磁矩, 是 Al_{Si} 与 V_{Si} 共同作用导致缺陷能级劈裂而产生的. 空位周围C原子的p轨道是局域磁矩的主要来源, 体系在c轴方向具有较强的磁耦合作用. C原子的p轨道电子是Al掺杂6H-SiC粉体磁性的主要来源.

感谢上海大学张文清教授和中国科学院上海硅酸盐研究所陈立东研究员的指导和讨论.

参考文献

- [1] Coey J 2005 *Solid State Sci.* **7** 660
- [2] Coey J, Venkatesan M, Fitzgerald C 2005 *Nat. Mater.* **4** 173
- [3] Coey J, Venkatesan M, Fitzgerald C, Douvalis A, Sanders I 2002 *Nature* **420** 156
- [4] Venkatesan M, Fitzgerald C, Coey J 2004 *Nature* **430** 630
- [5] Garcia M A, Merino J M, Pinel E F, Quesada A, de la Venta J, Gonzalez M L R 2007 *Nano. Lett.* **7** 1489
- [6] Ando K 2006 *Science* **312** 1883
- [7] Liu Y, Wang G, Wang S, Yang J, Chen L, Qin X 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 087205
- [8] Li L, Hua W, Prucnal S, Yao S D, Shao L, Potzger K 2012 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B: Beam Interact. Mater. Atoms* **275** 33
- [9] Wang Y T, Liu Y, Wendler E, Hubner R, Anwand W, Wang G 2015 *Phys. Rev. B* **92** 11
- [10] Song B, Bao H, Li H, Lei M, Peng T, Jian J 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 1376
- [11] Cheng W, Liu G Q, Zhang F S, Zhou H Y 2012 *Phys. Lett. A* **376** 3363
- [12] Zheng H W, Wang Z Q, Liu X Y, Diao C L, Zhang H R, Gu Y Z 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 3
- [13] Zheng H W, Yan Y L, Lü Z C, Yang S W, Li X G, Liu J D 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 4
- [14] Li Q, Xu J P, Liu J D, Ye B J 2016 *Mater. Res. Express* **3** 056103
- [15] Qin S, Guo X T, Cao Y Q, Ni Z H, Xu Q Y 2014 *Carbon* **78** 559
- [16] Panigrahy B, Aslam M, Misra D S, Ghosh M, Bahadur D 2010 *Adv. Funct. Mater.* **20** 1161
- [17] Grace P J, Venkatesan M, Alaria J, Coey J, Kopnov G, Naaman R 2009 *Adv. Mater.* **21** 71
- [18] Lin X L, Pan F C 2014 *J. Supercond. Nov. Magn.* **27** 1513
- [19] Wang Y T, Liu Y, Wang G, Anwand W, Jenkins C A, Arenholz E 2015 *Sci. Rep.* **5** 8999

Ferromagnetism of Al-doped 6H-SiC and theoretical calculation^{*}

Huang Yi-Hua[†] Jiang Dong-Liang Zhang Hui Chen Zhong-Ming Huang Zheng-Ren

(Structural Ceramics Engineering Research Center, The State Key Laboratory of High Performance Ceramics and Superfine Microstructure, Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China)

(Received 19 July 2016; revised manuscript received 29 September 2016)

Abstract

SiC with d^0 ferromagnetism is thought to be one of the most important materials in the spintronics field, and it has received widespread attention. In this paper, Al : SiC magnetic powder is fabricated by high temperature calcination method with the protection of Ar gas. X-ray diffraction results show that the obtained powder is of 6H-SiC phase, and Al is proposed to enter into the 6H-SiC crystalline. Raman results show that Ar gas plays a crucial role in impeding the SiC from decomposing at high temperature. With the protection of Ar gas, it maintains round shape after calcination about 2200 °C, no any other peak is detected in the Raman spectrum. Without the protection of Ar gas, SiC particle would decompose into graphite, and the instinct peak of graphite is detected in the Raman spectrum. Energy dispersive spectrometer results show that there is 0.96 at% Al in the powder. The obtained powder shows magnificent magnetic hysteresis loop and large coercive force. Its saturation magnetic moment reaches 0.07 emu/g after calcination at 1800 °C. Its coercive force reaches a maximum after calcination at 2000 °C, while the saturation magnetic moment is 0.012 emu/g. With the rise of calcination temperature, the magnetism of the powder changes from diamagnetism to ferromagnetism. But when the calcination temperature rises to 2200 °C or more, it would change back to diamagnetism. The phenomenon of ferromagnetism disappearing is similar to that in ZnO as reported. The total quantity of magnetic impurities (Fe, Co, Ni) is evaluated to be less than 5 ppm. Saturation magnetic moments arising from these impurities can be calculated to be less than 10^{-5} emu/g according to the reported results, which is impossible to affect the accuracy in the experiment. Thus it is proposed that the ferromagnetism originates from the doping of Al in SiC powder. To understand the origin of the observed magnetism, we carry out first principles calculations based on spin polarized density functional theory. All the calculations are performed by using the generalized gradient approximation in the form of the Perdew-Burke-Ernzerhof function, which is implemented in the Vienna *ab initio* simulation package. A supercell consisting of $3 \times 3 \times 1$ unit cells of 6H-SiC containing one $\text{Al}_{\text{Si}}\text{-V}_{\text{Si}}$, corresponding to a defect concentration of 0.93 at%, is built for calculations. The origin of its ferromagnetism is studied, and its spin situation in the space is mapped. The results show that the combination of Al and vacancy leads to a local magnetic moment of 1.0 μ_{B} , and magnetic coupling is steady in the c axis direction. It is found that the p electron of carbon is the origin of the net spin.

Keywords: d^0 ferromagnetism, SiC, high temperature calcination

PACS: 75.60.Ej, 71.20.-b, 75.75.Cd

DOI: 10.7498/aps.66.017501

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51572276), the Special Project of Supercomputing Science of Joint Fund of the National Natural Science Foundation of China and Guangdong Province, and the State Key Laboratory of High Performance Ceramics and Superfine Microstructure, China (Grant No. Y12ZC4120G).

[†] Corresponding author. E-mail: wyu@mail.sic.ac.cn