

ESTUDIO TEÓRICO DEL FERROMAGNETISMO DE LA SUPERFICIE m-GaN DOPADA CON Mn

THEORETICAL STUDY OF SURFACE FERROMAGNETISM m-GaN DOPED WITH Mn

Oscar Martínez, William López, Alvaro González, Rafael González

Grupo de Investigación en Física Aplicada, Departamento de Física, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia.

(Recibido: Septiembre/2016. Aceptado: Febrero/2017)

Resumen

Se realizaron cálculos de primeros principios para estudiar las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de la superficie m-GaN dopada con manganeso (Mn). Este dopaje generó un momento magnético total de $4 \mu_B$ debido a la interacción de los estados 2p-N y 3d-Mn. Se encontró que el dopaje de Mn es responsable del 82% de la magnetización total de la superficie. Además, el dopaje generó cambios estructurales en la superficie y se evidenciaron en las distancias entre las capas atómicas “ d_{12} , d_{23} , d_{34} , d_{45} ”. La superficie mostró propiedades de metal y semiconductor simultáneamente, estos materiales son llamados “half-metalic”, dependiendo de la polarización del espín. Se determinó la posición sustitucional del dopaje más estable energéticamente, así mismo se observó que este dopaje generó menos cambios estructurales como lo muestran los porcentajes de cambio en las distancias entre capas atómicas “ Δd_{12} , Δd_{23} , Δd_{34} , Δd_{45} ”.

Palabras clave: Densidad de estados, magnetismo superficial, nitruro de galio, teoría del funcional densidad.

Abstract

First principles calculations were performed to study the structural, electronic and magnetic properties of the surface of *m*-GaN doped with manganese (Mn). This doping generated total magnetic moment $4 \mu_B$ due to interaction of the 2p-N and Mn 3d-states. It was found that doping of Mn is responsible for 82% of the total magnetization of the surface. In addition, doping generated structural changes in the surface which were evident in the distances between the atomic layers “ d_{12} , d_{23} , d_{34} , d_{45} ”. The surface showed metal and semiconductor properties simultaneously. These materials are called “half-metallic” depending on the spin polarization. Substitutional position of the most stable energy doping was determined, and was observed that doping generated less structural changes as that shown by the changes in the distance between atomic layers “ Δd_{12} , Δd_{23} , Δd_{34} , Δd_{45} ”.

Keywords: Density of states, surface magnetism, gallium nitride, density functional theory.

1. Introduction

La continua construcción de dispositivos electrónicos más pequeños con varias funciones y menor consumo energético, es lo que ha impulsado la tecnología del uso del espín del electrón, además de su carga eléctrica como portador de información [1, 2]. El uso del espín es en la actualidad una de las áreas de investigación más activa en la ciencia de materiales y promete una verdadera revolución en la electrónica [3, 4]. Recientes estudios predicen que el nitruro de galio (GaN) dopado con metales de transición podrían exhibir ferromagnetismo a temperatura ambiente [2]. El GaN es un semiconductor de banda prohibida ancha que al doparlo con Mn presenta una magnetización de $4\mu_B$ [5]. Debido a esta magnetización y pensando en sus aplicaciones en dispositivos espintrónicos y optoelectrónicos, tales como memorias de alta velocidad, sensores magnéticos integrados y biodetectores, se ha motivado el estudio teórico y experimental del GaN dopado con Mn en los últimos años. Dichos dispositivos podrían funcionar

con menor consumo de energía y mayor capacidad para el procesamiento de datos [6, 7].

El ferromagnetismo del dopaje de nitruro de galio con metales de transición ha sido un tema controversial debido a las diferencias obtenidas en la magnetización cuando se aplican distintas técnicas de crecimiento, estas diferencias en la magnetización motivan el intenso trabajo para conocer el ferromagnetismo en el dopaje de GaN con manganeso (Mn) [8]. Este dopaje produce un semiconductor magnético diluido (SMD) debido a que se puede inducir magnetismo permanente a temperatura ambiente en GaN con impurezas de Mn [2]. Existen otros SMD como son: el óxido de zinc (ZnO) dopado con Mn, con momento magnético de $1.2 \mu_B$ con 4% de Mn [9] y el arseniuro de galio (GaAs) dopado con Mn muestra un momento magnético $3.84 \mu_B$ con 3% de Mn [10]. Este último tiene una temperatura de Curie inferior a la temperatura ambiente siendo esto un limitante para su utilización en dispositivos para espintrónica [11]. Por otro lado, el estudio del magnetismo en superficies ha sido estudiado en otros materiales como el nitruro de aluminio dopado con magnesio (AlN:Mg), donde se ha encontrado que la estabilidad de estas superficies varía de una a otra, debido a la localización de los momentos magnéticos en la superficie. Estudios anteriores atribuyen el magnetismo a defectos en la superficie. Por lo tanto, la identificación del magnetismo en la superficie es importante para la espintrónica [12].

2. Metodología

El estudio computacional se realizó con el método pseudopotencial en el marco de la teoría del funcional de densidad (DFT) [13]. Los electrones internos fueron descritos por el método proyector de onda aumentada (PAW) [14, 15], en el que los estados $3d$ para el Ga se incluyeron como electrones de valencia. Los cálculos de energía total se realizaron con el paquete de simulación VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [16, 17]. La función de onda de los electrones se expandió en ondas planas hasta una energía de corte de 550 eV. Una malla centrada en gamma de $6 \times 6 \times 1$ puntos k , se utilizó para el muestreo de la zona de Brillouin irreducible de la

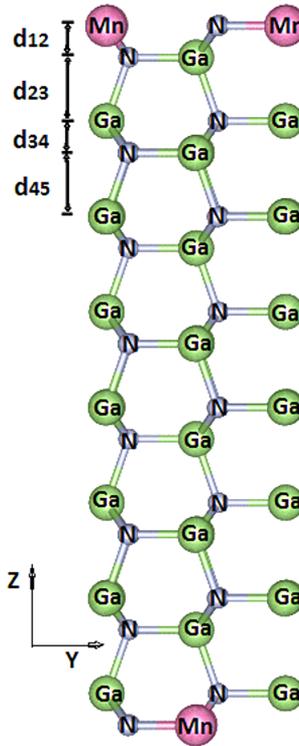


FIGURA 1. Estructura del plano *m* de GaN dopado con Mn. Se muestra la estructura con Mn en la capa 1.

superficie no polar, en el esquema especial Monkhorst-Pack [18]. Se adoptó la técnica smearing de Methfessel-Paxton con una anchura de 0.20 eV [19]. Estos parámetros garantizan una convergencia menor que 1 meV para la energía total. La superficie no polar *m*-GaN se modeló usando el enfoque de súpercelada, donde se aplican las condiciones de contorno periódicas a una celda central, de modo que se repite periódicamente en todo el espacio tridimensional. Una terraza simétrica de dieciséis capas de GaN se utilizará para simular la superficie *m*-GaN ($10\bar{1}0$) como lo muestra la figura 1. Se seleccionó una región de vacío de $\sim 16 \text{ \AA}$ en la dirección ortogonal a las superficies. Con el fin de mantener la simetría de la terraza para los cálculos de energía superficial, las capas centrales fueron fijadas en posiciones en volumen de GaN; mientras que en las cuatro capas de la superficie se relajaron las posiciones atómicas.

La incorporación se realizó en ambos lados de cada terraza. Las optimizaciones estructurales finalizaron cuando la magnitud de la fuerza que actúa sobre cada ion era menos de 1 mRy/Bohr.

3. Análisis de resultados

	d_{Mn-N} (Å)	E_F (eV)	ϕ (eV)	MMT (μ_B)	MMT_{Mn} (μ_B)	Δd_{12} (%)	Δd_{23} (%)	Δd_{34} (%)	Δd_{45} (%)
Limpia	1.966	1.650	5.674	0.000	–				
Capa1	1.829	0.618	3.936	4.041	3.421	-15.431	2.971	-1.913	0.443
Capa2	1.895	0.927	3.902	3.991	3.114	-19.673	3.626	-2.405	0.567
Capa3	1.949	1.104	5.077	4.000	3.349	-26.516	7.829	-1.249	1.103

TABLA 1. *Distancia de enlace entre Mn y su primer vecino de N (d_{Mn-N}), energía de Formación E_F (eV), función de trabajo ϕ (eV), momento magnético total MMT (μ_B), momento magnético del manganeso MMT_{Mn} (μ_B), porcentaje de cambio de la distancia entre capas atómicas Δd_{ij} (%).*

En la Tabla 1, se representa como “limpia” a la superficie m-GaN sin dopaje. Asi mismo, capa1, capa2 y capa3 representan la sustitución de Ga por Mn en la primera, segunda y tercera capa respectivamente. El porcentaje de cambio de la distancia entre capas se calculó de la siguiente forma:

$$\Delta d_{ij} = \frac{d_{ij} - d_{ij}^0}{d_{ij}^0} \cdot 100 \% \quad (1)$$

Donde $i = 1, 2, 3..$ y $j = 2, 3, 4..$, d_{ij} son las distancias entre capas atómicas: por ejemplo en la figura 1, d_{ij}^0 son las distancias entre capas de la superficie sin relajar. En la tabla se observa que al ir introduciendo el Mn en las capas del volumen, es decir en la capa1, capa2 y capa3, la distancia entre el manganeso y nitrógeno (d_{Mn-N}) fueron menor que la distancia d_{Mn-N} en la superficie sin relajar. Se observa que la función trabajo fue menor en la superficie m-GaN dopada con Mn que en la superficie sin relajar, es decir es más fácil desprender electrones de las capas dopadas que de la superficie sin relajar. De la tabla se puede inferir cuál es la capa más estable observando la que presente menor energía de formación, es decir, la capa que emplea menor energía para formar un mol a partir sus elementos, en este caso es la capa1,

por tanto el Mn tenderá a incorporarse en la capa superior. A la vez este dopaje mostró menos cambios estructurales como lo muestran los porcentajes de cambio en las distancias entre capas atómicas “ Δd_{12} , Δd_{23} , Δd_{34} , Δd_{45} ”. La tabla muestra un momento magnético total en promedio de $4 \mu_B$ para la superficie m-GaN dopada con Mn, siendo el dopaje de Mn el elemento responsable del 82% de la magnetización total de la superficie.

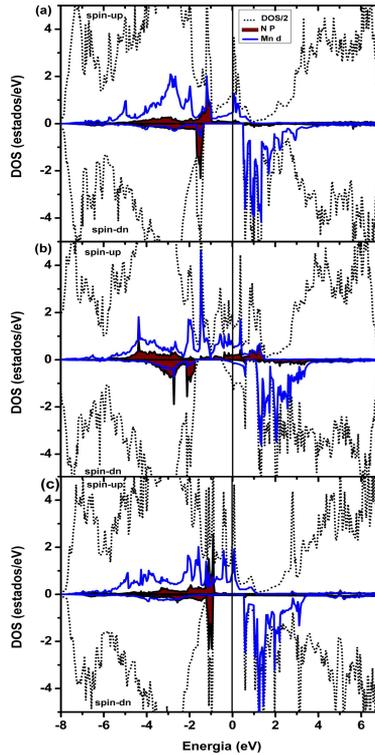


FIGURA 2. Densidad de estados total (DOS) (línea punteada) y parcial (PDOS) del plano m de GaN dopado con Mn. (a) capa1, (b) capa2 y (c) capa3. Estados 3d de Mn (línea gruesa azul) y 2p del Nitrógeno (área color marrón). La energía de Fermi se fija en cero. Las densidades de estado positivas corresponden a la región de espín mayoritario (spin-up) y las negativas a la región de espín minoritario (spin-dn).

En la Figura 2 se presenta la densidad de estados total (DOS) y parcial (PDOS) de la superficie m-GaN dopada con Mn. En la figura 2(a) en la región de espín mayoritario (spin-up) se pueden

observar estados, que cortan el nivel de Fermi (Línea vertical en 0 eV), presentando un comportamiento metálico. Mientras que en la región de espín minoritario (spin-dn) no hay estados cerca del nivel de Fermi, exhibiendo un comportamiento semiconductor con una brecha de energía de ~ 0.5 eV. Este tipo de comportamiento es denominado “half-metallic”.

Con respecto a la densidad de estados parcial (PDOS) en la región spin-up, por debajo del nivel de Fermi, podemos observar una mayor contribución de los estados 3d-Mn (línea gruesa azul) entre el rango de energías de -4 a -1 eV y una menor contribución de los estados 2p-N

References

- [1] G. A. Prinz, *Science* **282**, 1660 (1998).
- [2] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, *Science* **287**, 1019 (2000).
- [3] B. Sanyal, O. Bengone, and S. Mirbt, *Phys. Rev. B* **68**, 205210 (2003).
- [4] S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [5] G.-X. Chen, D.-D. Wang, J.-Q. Wen, A.-P. Yang, and J.-M. Zhang, *Int. J. of Quantum Chem.* **116**, 1000 (2016).
- [6] R. González-Hernández, A. González-García, and W. López-Pérez, *Comp. Mater. Sci.* **83**, 217 (2014).
- [7] N. Theodoropoulou, A. Hebard, D. Norton, J. Budai, L. Boatner, J. Lee, Z. Khim, Y. Park, M. Overberg, S. Pearton, and R. Wilson, *Solid State Electron.* **47**, 2231 (2003).
- [8] S. Gupta, W. Fenwick, A. Melton, T. Zaidi, H. Yu, V. Rengarajan, J. Nause, A. Ougazzaden, and I. Ferguson, *J. Cryst. Growth* **310**, 5032 (2008).
- [9] U. Philipose and G. Sapkota, in *Nanowires - Recent Advances*, edited by X. Peng (InTech., 2012) Chap. 3.
- [10] H. Lin and H. Duan, *Sci. China Ser. G* **51**, 470 (2008).
- [11] L. Kronik, M. Jain, and J. R. Chelikowsky, *Phys. Rev. B* **66**, 041203 (2002).

- [12] S. Chintalapati, Y. Cai, M. Yang, L. Shen, and Y. P. Feng, *Jpn. J. Appl. Phys.* **54**, 110302 (2015).
- [13] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [14] P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- [15] G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [16] G. Kresse and J. Furthmüller, *Comp. Mater. Sci.* **6**, 15 (1996).
- [17] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [18] H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- [19] M. Methfessel and A. T. Paxton, *Phys. Rev. B* **40**, 3616 (1989).