

# Co 掺杂 GaSb 电子结构和磁特性的第一性原理研究

林雪玲, 潘凤春, 张贺翔

(宁夏大学 物理与电子电气工程学院, 银川 750021)

**摘要:**运用基于密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)框架下的第一性原理计算方法,研究了 Co 掺杂 GaSb 半导体的电子结构和磁特性,交换关联泛函采用局域密度近似(Local Density Approximation, LDA),通过  $U$  的引入对 Ga- $d$  电子和 Sb- $p$  电子的库仑作用势能进行修正,计算得到 GaSb 的禁带宽度和晶格常数与实验值相符.计算结果表明,Co 替代 Ga(Co@Ga)缺陷可以产生  $2\mu_B$  的局域磁矩,而 Co 替代 Sb(Co@Sb)缺陷对体系的局域磁矩没有贡献.Co@Ga 产生局域磁矩之间的耦合为铁磁耦合,其居里温度的理论计算值高达 410 K.对 Co 掺杂 GaSb 半导体的铁磁耦合机制进行了解释,为实验上制备 GaSb 基铁磁性半导体提供了理论依据.

**关键词:** GaSb; Co 掺杂; 电子结构; 磁特性; 第一性原理计算

**中图分类号:** O433

**文献标志码:** A

磁性半导体是自旋电子学领域的关键材料.它结合了电子的电荷属性和自旋属性,作为具有重要应用前景和丰富物理内涵的新型电子材料而受到了广泛的关注,在传统的半导体里面掺杂磁性元素是获得磁性半导体材料的重要途径<sup>[1-4]</sup>.由于过渡族金属(Transition Metal, TM)元素的  $d$  电子轨道是部分占据的,因此 TM 属于磁性元素,是实现磁性半导体掺杂的常用元素.利用 TM 掺杂 II-VI 族和 III-V 族半导体获得高温铁磁性半导体,无论是实验上还是理论上都获得了广泛的研究,比如 ZnO, TiO<sub>2</sub>, GaAs, GaN, InAs 等<sup>[5-12]</sup>. TM 掺杂的磁性半导体的磁性来源展现了丰富的物理内容和不同的磁特性: Mn 掺杂的 II-VI 族半导体产生局域磁矩之间的耦合通常是反铁磁(Antiferromagnetic, AFM)耦合的,而 Mn 掺杂的 GaN 产生局域磁矩之间的耦合既可以是铁磁(Ferromagnetic, FM)耦合的也可以是反铁磁耦合的,其原因在于掺杂的位置和半导体生长条件的不同<sup>[13-15]</sup>.作为 III-V 族半导体, GaSb 具有高的电子和空穴迁移率,被认为是一种应用前景广阔的半导体<sup>[16]</sup>,有望取代传统的 Si 半导体和氧化物半导体.相比于 GaAs 和 GaN 等其他 III-V 族半导体, GaSb 基磁性半导体中磁矩的起源,以及局域磁矩之间的耦合机制并没有得到充分的研究. TM 掺杂 GaSb 半导体的一些研究工作表明<sup>[17-18]</sup>, TM 掺杂的 GaSb 基铁磁性半导体在自旋电子学领域并没有获得广泛的应用,主要在于居里温度(Curie temperature,  $T_C$ )太低.因此本文研究 Co 掺杂 GaSb 半导体材料的电子结构和磁矩之间的耦合机制,希望对 TM 掺杂的 GaSb 基铁磁性半导体中磁性起源得出一般性的结论,为实验上制备高  $T_C$  的本征 GaSb 基铁磁性半导体提供理论依据.

## 1 研究方法和模型的构建

本文用基于密度泛函理论的 CASTEP<sup>[19]</sup> 软件进行研究. GaSb 为窄禁带 III-V 族半导体,为闪锌矿结构,其晶格常数为  $a=b=c=0.6095$  nm,禁带宽度在 0 K 时为 0.813 eV, 300 K 时为 0.811 eV<sup>[20-21]</sup>. 将一个包含 8 个原子的 GaSb 原胞分别沿  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向进行  $2 \times 2 \times 2$  扩展得到包含 64 个原子的超晶胞作为计算体系. 电子体系波函数用平面波波函数展开,体系电荷密度和总能量在布里渊区进行积分计算,平面波截断能为 330 eV,基态能量采用 Pulay 密度混合法,自洽精度为每个原子  $5.0 \times 10^{-7}$  eV,采用 Monkhorst-

收稿日期:2019-01-23;修回日期:2019-03-12.

基金项目:宁夏大学自然科学基金(ZR18008)

作者简介(通信作者):林雪玲(1982-),女,山东临沂人,宁夏大学副教授,博士,主要从事半导体的光学、磁学性质研究, E-mail: nxulxl@163.com.

Pack<sup>[22-23]</sup>方案选取 K 空间网格点,布里渊区 K 网格点选取为  $3 \times 3 \times 3$ .交换关联泛函采用能正确反映固体电子密度及晶体结构特性的 LDA-CA-PZ 泛函来处理电子间的交换关联效应,选取的赝势为超软赝势(Ultra Soft),并对 Ga-3d 电子和 Sb-5p 电子的库仑作用势能进行修正,当采用 LDA+U( $U_{\text{Ga-3d}} = 2.5$  eV,  $U_{\text{Sb-5p}} = 2.6$  eV)时,计算得到 GaSb 体系的晶格常数为: $a = b = c = 0.5984$  nm,禁带宽度为 0.812 eV,计算结果与实验结果相吻合,可见 U 值的选取是合理的<sup>[24]</sup>.

Co 掺杂 GaSb 有 2 种基本的缺陷类型,分别为 Co@Ga 和 Co@Sb,对于这 2 种缺陷结构的形成能计算公式如下<sup>[25]</sup>

$$E_{f(\text{Co@X})} = E_{\text{defect}} - E_{\text{perfect}} - \mu_{\text{Co}} + \mu_X, \quad (1)$$

其中  $E_{\text{defect}}$  和  $E_{\text{perfect}}$  分别代表 Co 掺杂的和未掺杂的 GaSb 超晶胞体系的总能量, X 代表 Ga 原子或者 Sb 原子,因此  $\mu_X$  代表 Ga 或 Sb 的化学势,  $\mu_{\text{Co}}$  表示 Co 原子的化学势.对于 Co@Ga 缺陷,其数值分别为: $E_{\text{defect}} = -69666.738$  eV,  $E_{\text{perfect}} = -70679.194$  eV,  $\mu_{\text{Co}} = -1042.819$  eV,  $\mu_{\text{Ga}} = -2055.298$  eV.对于 Co@Sb 缺陷,分别为: $E_{\text{defect}} = -71571.046$  eV,  $E_{\text{perfect}} = -70679.194$  eV,  $\mu_{\text{Co}} = -1042.819$  eV,  $\mu_{\text{Sb}} = -153.103$  eV.计算结果表明,Co@Ga 缺陷的形成能为 0.023 eV,Co@Sb 缺陷的形成能为 2.136 eV.在热平衡状态下,缺陷的浓度可用下式表示<sup>[25]</sup>

$$C = N_{\text{sites}} N_{\text{config}} \exp(-E_f/k_B T), \quad (2)$$

其中,  $E_f$  为形成能,  $N_{\text{sites}}$  为材料中可形成的该缺陷的数目,  $N_{\text{config}}$  为缺陷等价位型数目,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度.计算结果表明在 Co 原子掺杂的 GaSb 体系中 Co@Ga 缺陷的浓度高于 Co@Sb,这一点也可以从原子半径尺寸大小这一因素得出结论.计算结果表明 Co@Sb 缺陷并不会在体系中产生局域磁矩,因此本文只选取 Co@Ga 这一缺陷类型的电子结构和磁特性作了理论计算,并对局域磁矩之间的耦合特性作了详细的分析.

为了计算局域磁矩之间的磁耦合特性,在包含 64 个原子的超晶胞中引入 2 个缺陷,设定初始自旋即可计算 FM 耦合和 AFM 耦合体系的总能量,根据两者的能量差  $\Delta E$  来判断磁矩之间耦合的强度及稳定性,  $\Delta E$  的计算公式如下

$$\Delta E = E_{\text{AFM}} - E_{\text{FM}}, \quad (3)$$

式中  $E_{\text{AFM}}$  和  $E_{\text{FM}}$  分别表示 AFM 耦合体系和 FM 耦合体系的总能量.若掺杂体系产生局域磁矩之间的耦合为 FM 耦合,则可以通过如下公式来估算 FM 耦合体系的  $T_C$ ,其计算公式如下<sup>[26]</sup>

$$T_C = \frac{2\Delta E}{3k_B x}, \quad (4)$$

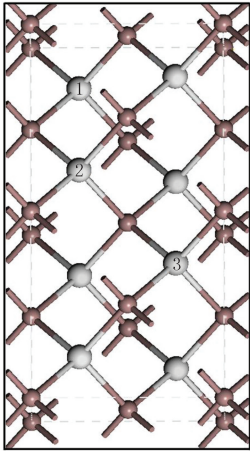
式中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $x$  表示掺杂体系中缺陷的数目.为了考察 Co@Ga 缺陷产生局域磁矩之间的耦合特性及距离对耦合强度的影响,设计 2 种不同的结构进行计算,见图 1.用 2 个 Co 原子分别替代 1 号和 2 号 Ga 原子,这样在体系中引入了 2 个 Co@Ga 缺陷,此种结构为 S(12),用 2 个 Co 原子分别替代 1 号和 3 号 Ga 原子,此种结构为 S(13).

## 2 计算结果与分析

### 2.1 Co@Ga 缺陷的电子结构和磁特性分析

在含有一个 Co@Ga 缺陷的 GaSb 超晶胞的体系中,Co 原子、Ga 原子和 Sb 原子的电子组态分别为  $\text{Co-}4s^2 3d^7$ ,  $\text{Ga-}3d^{10} 4s^2 4p^1$  和  $\text{Sb-}4d^{10} 5s^2 5p^3$ .掺杂的 Co 原子提供 2 个 4s 电子和 1 个 3d 电子,与周围的 4 个 Sb 原子的 2p 电子成键,因此 Co 原子的五重简并 3d 轨道上的电子数目变为 6 个,在由 4 个 Sb 原子构成的四面体晶场中,5 重简并的 3d 电子轨道将分裂成一个 3 重简并的  $t$  轨道能级和一个 2 重简并的  $e$  轨道能级<sup>[27]</sup>,此时 Co@Ga 缺陷的电子结构可以表示为  $e_+^2 e_-^2 t_+^2 t_-^0$  (下标“+”和“-”分别表示自旋向上和自旋向下),可以看出 3 重简并的  $t$  轨道能级电子占据是未半满的,产生  $2\mu_B$  的局域磁矩,与计算结果相符合.图 2 给出了含有 Co@Ga 缺陷体系沿第一布里渊区高对称方向的能带结构图,位于 0 eV 处对应费米能级.从图 2 可以看出,禁带中出现了由于 Co 掺杂而引入的杂质能级,杂质能级的出现导致了掺杂体系的价带顶下移,费米能级跨过  $t_+$  能级,而位于 0 点费米能级以上的  $t_-$  能级是没有电子占据的空带,电子满占据的低

能量  $e$  轨道能级进入价带里面.



大球和小球分别表示 Ga 原子和 Sb 原子

图1 GaSb 体系中 Co@Ga 缺陷不同位置的结构示意图

Fig.1 Structures of different Co@Ga defect sites in GaSb

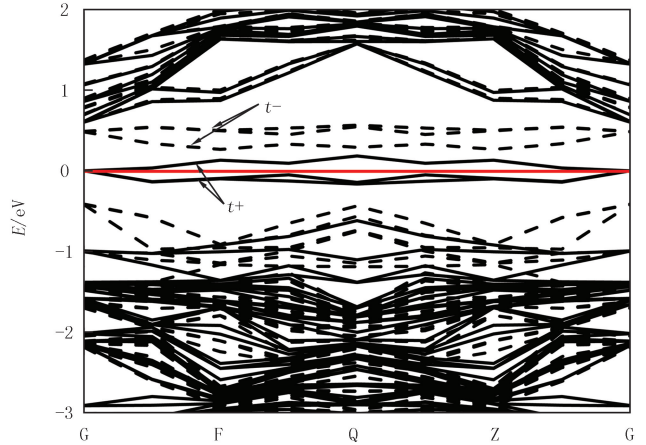


图2 Co@Ga 体系的能带结构图

Fig.2 The band structure of Co@Ga system

为了展现 Co@Ga 缺陷所产生的局域磁矩的空间分布特点,给出了包含一个 Co@Ga 缺陷的电子自旋密度分布图,见图 3,等值面为  $0.05 e/nm^3$ .从图 3 可以看出,磁矩主要分布在掺杂的 Co 原子上,近邻的 4 个 Sb 原子和次近邻的 Sb 原子也产生了少量磁矩,Co@Ga 缺陷所产生的磁矩具有即局域又扩展的特性.理论分析表明,掺杂的 Co 原子产生的磁矩为  $1.86\mu_B$ ,占体系总磁矩 ( $2\mu_B$ ) 的 93%,而 Co 原子周围近邻的 4 个 Sb 原子产生的总磁矩为  $0.12\mu_B$ ,占体系总磁矩的 6%,其余  $0.02\mu_B$  的磁矩由 Co 原子次近邻的 Sb 原子提供,占体系总磁矩的 1%.

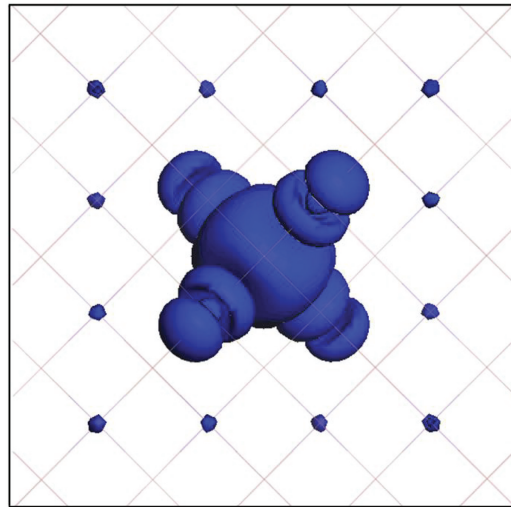


图3 等值面为  $0.05e/nm^3$  的 Co@Ga 缺陷体系的自旋密度分布图

Fig.3 The spin density for Co@Ga system, the isovalue is set to  $0.05e/nm^3$

为了进一步分析 Co@Ga 结构体系的电子结构,图 4 给出了掺杂体系中 Co 原子和近邻 Sb 原子的投影态密度图(Projected Density of States, PDOS).从图 4(a)和图 4(b)可以看出,Co- $p$  电子和 Co- $d$  电子的态密度图上下不对称,发生了自旋劈裂,因此 Co 原子上的磁矩主要由 Co- $p$  电子和 Co- $d$  电子共同产生,从纵轴坐标的数值来看,Co- $d$  电子起了主要作用.从图 4(c)可以看出,Sb- $p$  电子轨道也发生了自旋劈裂,因此 Co 原子周围 4 个 Sb 原子的磁矩主要由 Sb- $p$  电子产生.从图 4(a)和图 4(c)可以看出,Co- $p$  电子和 Sb- $p$  电子的态密度展宽相近,而从图 4(b)和图 4(c)看出 Co- $d$  电子和 Sb- $p$  电子的态密度峰值位置相同,因此认为 Co 原子和周围的 4 个 Sb 原子有较强的轨道耦合作用,Co@Ga 缺陷产生的局域磁矩是两者共同作用的结果.

## 2.2 Co@Ga 缺陷产生局域磁矩之间的耦合

在分析 Co@Ga 缺陷产生局域磁矩之间的耦合特性之前,先给出了掺杂体系和未掺杂体系 GaSb 超晶胞中原子的 Mulliken 布居分析.Mulliken 电荷的键布居(Bond Population)呈现了晶体中原子的成键特性,其数值在  $0\sim 1$  之间,数值越大表示共价键性越强,数值变小则表示键的离子性成分增强.原子的电荷布居

(Charge)则反映了 2 个成键原子之间的得失电子情况,得电子为负,失电子为正.表 1 给出了包含 64 个原子的未掺杂体系 ( $Ga_{32}Sb_{32}$ )和包含一个  $Co@Ga$  缺陷的掺杂体系 ( $Ga_{31}CoSb_{32}$ )的布居分析的计算值.可以看出在未掺杂的  $Ga_{32}Sb_{32}$  体系中, Ga 原子的电荷布居为  $0.09e$ ,表明 Ga 是失电子的, Ga-Sb 键的键布居为  $0.58$ ,说明在未掺杂体系中, Ga-Sb 键是既有离子键又有共价键成分的混合键.而包含一个  $Co@Ga$  缺陷的  $Ga_{31}CoSb_{32}$  体系中, Co 原子的电荷布居为  $0.12e$ ,表明相比于 Ga 原子, Co 原子失电子数目增加,相比于 Ga-Sb 键来说 Co-Sb 键的键布居数( $0.56$ )变小,说明掺杂 Co 原子后, Co-Sb 键的离子键成分增加,这导致了 Co-Sb 键的键长变为了  $0.2693\text{ nm}$ ,键长变长.

由以上的分析可知,一个  $Co@Ga$  缺陷可以产生  $2\mu_B$  的局域磁矩,且磁矩主要局域在 Co 原子上, Co 原子相比于替代的 Ga 原子失电子数增多.为了分析  $Co@Ga$  缺陷产生局域磁矩之间的耦合特性,在图 1 中设计了 2 种结构,即 S(12)和 S(13).设定初始自旋即可计算 FM 耦合和 AFM 耦合体系的能量差,并根据能量差计算了 FM 耦合状态下体系的  $T_C$ ,计算结果见表 2.

表 1  $Ga_{32}Sb_{32}$  体系和  $Ga_{31}CoSb_{32}$  体系的 Mulliken 布居分析

Tab.1 Mulliken populations of  $Ga_{32}Sb_{32}$  and  $Ga_{31}CoSb_{32}$  systems, respectively

Structures	Atom	Charge/ $e$	Bond	Population	Length/ $nm$
$Ga_{32}Sb_{32}$	Ga	0.09	Ga-Sb	0.58	0.263 2
	Sb	-0.09			
$Ga_{31}CoSb_{32}$	Co	0.12	Co-Sb	0.56	0.269 3

从表 2 可以看出:结构 S(12)中 2 个  $Co@Ga$  缺陷之间的距离为  $0.4310\text{ nm}$ ,局域磁矩之间反铁磁耦合状态下和铁磁耦合状态下体系的能量差,  $\Delta E = E_{AFM} - E_{FM}$  为  $0.11\text{ eV}$ ,说明在 S(12)结构体系中,  $Co@Ga$  缺陷产生的局域磁矩倾向于 FM 耦合,利用公式(3)计算得到 Co 掺杂 GaSb 体系  $T_C$  的为  $410\text{ K}$ ;结构 S(13)

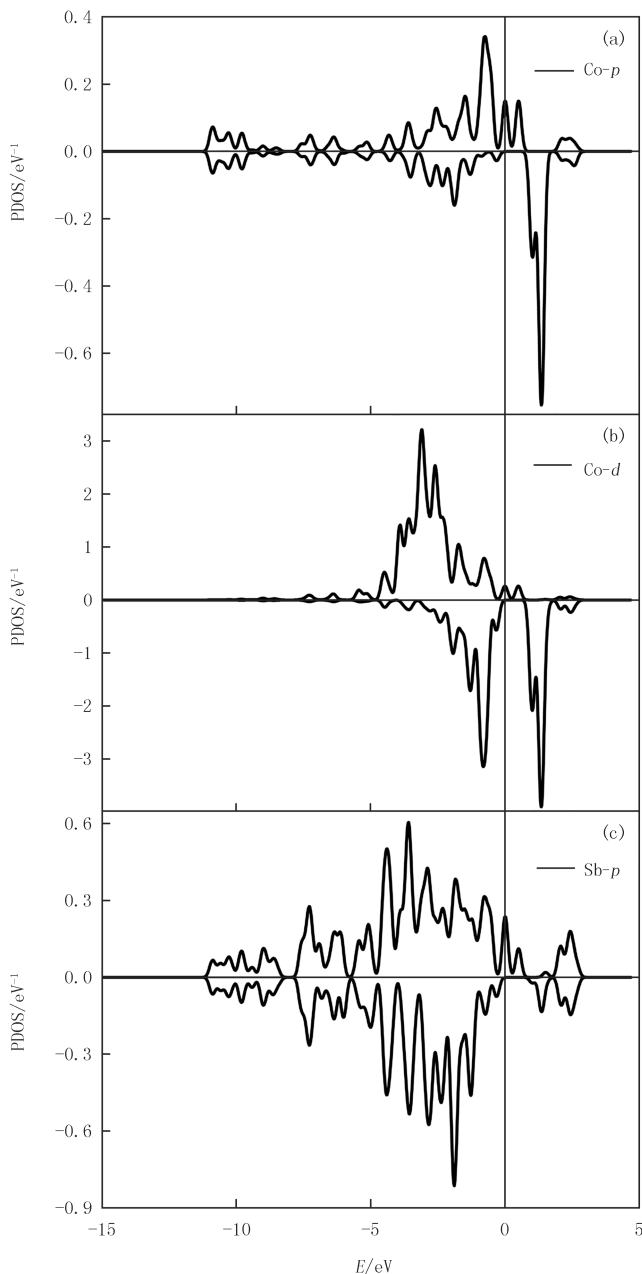


图 4  $Co@Ga$  体系投影态密度

Fig. 4 PDOS of  $Co@Ga$  system

中 2 个缺陷之间的距离增加为 0.746 5 nm, 计算结果表明此构型下由 Co@Ga 缺陷产生局域磁矩之间的耦合仍倾向于 FM 耦合, 且居里温度的理论计算值为 347 K. 从以上分析可以看出, Co@Ga 缺陷距离之间的增加, 局域磁矩之间的 FM 耦合强度有所降低, 但仍保持了局域磁矩之间是 FM 耦合的这一特性. 该计算结果表明, 在 Co 掺杂的 GaSb 体系有望得到  $T_C$  高于室温的铁磁性半导体.

直接交换作用模型和间接交换作用模型通常来解释磁性半导体中局域磁矩之间的耦合特性. 本文中由 Co@Ga 产生局域磁矩之间的耦合可以用直接交换作用模型来解释, 即价电子轨道之间的直接交叠. Co@Ga 缺陷的电子结构为  $e^2_+ e^2_- t^2_+ t^0_-$ , 其中  $t_+$  轨道能级电子是没有占满的, 按照直接交换作用模型, 一个 Co@Ga 缺陷的  $t_+$  轨道上的电子跃迁到另一个 Co@Ga 缺陷的  $t_+$  轨道上时不会发生电子自旋反向的情况, 即 2 个 Co@Ga 缺陷产生局域磁矩之间的耦合是 FM 耦合, 这一理论分析和本文的计算结果是相符的.

### 3 结 论

运用第一性原理 LDA+U 的方法研究了 Co 掺杂 GaSb 半导体的电子结构和磁特性, 得到的结论如下: 1) Co 掺杂的 GaSb 体系中, 掺杂 Co 离子在费米能级处产生杂质能级, 杂质能级跨过费米能级, 一个 Co@Ga 缺陷可以产生  $2\mu_B$  的局域磁矩, 磁矩主要分布在 Co 原子, Co@Ga 缺陷的电子结构为  $e^2_+ e^2_- t^2_+ t^0_-$ ; 2) 包含一个 Co@Ga 缺陷的超晶胞的 PDOS 图可以得知, Co 原子和周围的 4 个 Sb 原子有较强的轨道耦合作用, Co@Ga 缺陷产生的局域磁矩是两者共同作用的结果, 掺杂的 Co 原子产生的磁矩为  $1.86\mu_B$ , Co 原子周围近邻的 4 个 Sb 原子和次近邻的 Sb 原子产生的磁矩为  $0.14\mu_B$ ; 3) Co@Ga 缺陷产生局域磁矩之间的耦合为 FM 耦合, FM 耦合状态下的  $T_C$  最高达到了 410 K, 局域磁矩之间的 FM 耦合机制可以用直接交换模型来解释. 本文的计算结果表明在 Co 掺杂 GaSb 体系中有望得到高于室温的铁磁性半导体. 这为实验上制备 GaSb 基铁磁性半导体提供了一定的理论依据.

表 2 反铁磁和铁磁状态下 S(12) 和 S(13) 结构的能量差及居里温度

Tab.2 The energy difference and  $T_C$  between AFM and FM states for S(12) and S(13) structures

Structures	$D/\text{nm}$	$E_{\text{FM}}/(\text{eV})$	$E_{\text{AFM}}/(\text{eV})$	$\Delta E/(\text{eV})$	$T_C/\text{K}$
S(12)	0.431 0	-68 585.35	-68 585.24	0.11	410
S(13)	0.746 5	-68 585.39	-68 585.30	0.09	347

### 参 考 文 献

- [1] Wolf S A, Awschalom D D, Buhrman R A, et al. Spintronics: a spin-based electronics vision for the future[J]. Science, 2001, 294(5546): 1488-1495.
- [2] Pearton S J, Abernathy C R, Norton D P, et al. Advances in wide bandgap materials for semiconductor spintronics[J]. Mater Sci Eng R, 2003, 40(4): 137-168.
- [3] Ohno H. (Ga, Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs[J]. Appl Phys Lett, 1996, 69(3): 363.
- [4] Munekata H, Ohno H, von Molnar S, et al. Diluted magnetic III-V semiconductors[J]. Phys Rev Lett, 1989, 63: 1849.
- [5] Da Pieve F, Di Matteo S, Rangel T, et al. Origin of magnetism and quasiparticles properties in Cr-doped  $\text{TiO}_2$ [J]. Phys Rev Lett, 2013, 110: 136402.
- [6] Errico L A, Renteria M, Weissmann M. Theoretical study of magnetism in transition-metal-doped  $\text{TiO}_2$  and  $\text{TiO}_{2-\delta}$ [J]. Phys Rev B, 2005, 72: 184425.
- [7] Jungwirth T, Wang K Y, Masek J, et al. Prospects for high temperature ferromagnetism in (Ga, Mn)As semiconductors[J]. Phys Rev B, 2005, 72: 165204.
- [8] Pratibha D, Xue Y, Zhang P H. Defect-induced intrinsic magnetism in wide-gap III nitrides[J]. Phys Rev Lett, 2008, 100: 117204.
- [9] Wang Q, Sun Q, Chen G, et al. Vacancy-induced magnetism in ZnO thin films and nanowires[J]. Phys Rev B, 2008, 77: 205411.
- [10] Zajac M, Gosk J. Paramagnetism and antiferromagnetic d-d coupling in GaMnN magnetic semiconductor[J]. Appl Phys Lett, 2001, 79: 2432.
- [11] Filippone F, Mattioli G, Alippi P, et al. Clusters and magnetic anchoring points in (Ga, Fe) N condensed magnetic semiconductors[J]. Phys Rev Lett, 2011, 107: 196401.
- [12] Zhou S Q, Cizmar E, Potzger K, et al. Origin of magnetic moments in defective  $\text{TiO}_2$  single crystals[J]. Phys Rev B, 2009, 79: 113201.

- [13] Lin X L, Yan S S, Zhao M W, et al. Long-ranged and high temperature ferromagnetism in (Mn,C)-codoped ZnO studied by first-principles calculations[J]. *J Appl Phys*, 2010, 107: 033903.
- [14] Gebicki W, Straszewski J. Raman scattering study of  $Ga_{1-x}Mn_xN$  crystals[J]. *Appl Phys Lett*, 2000, 76: 3870.
- [15] Reed M L, El-Masry N A, Stadelmaier H H, et al. Room temperature ferromagnetic properties of (Ga,Mn)N[J]. *Appl Phys Lett*, 2001, 79: 3473.
- [16] del Alamo J A. Nanometre-scale electronics with III-V compound semiconductors[J]. *Nature*, 2011, 479: 317-323.
- [17] Thanh N, Nam P, Duc L, et al. (Ga,Fe)Sb: A p-type ferromagnetic semiconductor[J]. *Appl Phys Lett*, 2014, 105: 132402.
- [18] Sena N, Dussan A, Mesa F, et al. Electronic structure and magnetism of Mn-doped GaSb for spintronics applications: A DFT study[J]. *J Appl Phys*, 2016, 120: 051704.
- [19] Perdew J P, Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy[J]. *Phys Rev B*, 1992, 45(23): 13244-13249.
- [20] Dutta P S, Bhat H L. The physics and technology of gallium antimonide: An emerging optoelectronic material[J]. *J Appl Phys*, 1997, 81(9): 5821-5870.
- [21] Vurgaftman I, Meyer J R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys[J]. *J Appl Phys*, 2001, 89(11): 5815-5875.
- [22] Pack J D, Monkhorst H J. "Special points for Brillouin-zone integrations"-a reply[J]. *Phys. Rev. B*, 1977, 16(4): 1748-1749.
- [23] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin-zone integrations[J]. *Phys. Rev. B*, 1976, 13(12): 5188-5192.
- [24] 林雪玲, 潘凤春, 孙建军. GaSb 中 p 型缺陷电子结构和光学性质的第一性原理研究[J]. *山东师范大学学报(自然科学版)*, 2018, 33(3): 328-333.
- [25] Van de Walle C G, Neugebauer J. First-principles calculations for defects and impurities: Applications to III-nitrides[J]. *J Appl Phys*, 2004, 95: 3851.
- [26] Kudrnovsky J, Turek I, Drchal V, et al. Exchange interactions in III-V and group-IV diluted magnetic semiconductors[J]. *Phys Rev B*, 2004, 69: 115208.
- [27] Lin X L, Pan F C. Mn doped GaSb may be a good candidate for ferromagnetic semiconductor predicted by the DFT+U approach[J]. *Material Res Exp*, 2019, 6: 015901.

## Electronic structures and magnetic properties of Co doped GaSb based on the first-principles calculations

Lin Xueling, Pan Fengchun, Zhang Hexiang

(School of Physics and Electronic-Electrical Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

**Abstract:** The electronic structures and magnetic properties of Co doped GaSb are investigated systematically by the first-principles calculations based on the Density Functional Theory(DFT). For the exchange-correlation function, the Local Density Approximation(LDA)+ $U$  method are performed on Ga- $d$  and Sb- $p$ . The calculated band-gap and crystal constants are in good agreement with experimental values. The results show that the defect Co@Ga can induce  $2\mu_B$  local magnetic moment in the system, while the Co@Sb cannot induce local magnetic moment. The magnetic interaction between Co@Ga is ferromagnetic, and we estimated the Curie temperature of about 410 K for the S(12) configuration. The ferromagnetic coupling mechanism is discussed in this paper. The research results shed light on the potential of the system as a good candidate for ferromagnetic semiconductor with higher Curie temperature.

**Keywords:** GaSb; Co doped; electronic structures; magnetic properties; the first-principles calculations

[责任编辑 杨浦 王凤产]