



Co 掺杂 4H-SiC 电子结构的第一性原理计算

林 龙^{1,2}, 祝令豪¹, 李先宏¹, 张志华², 何 明², 陶华龙², 徐永豪³, 张战营¹, 曹建亮¹

(1. 河南理工大学 材料科学与工程学院 环境友好型无机材料重点实验室培育基地, 焦作 454000;

2. 大连交通大学 材料科学与工程学院, 大连 116028;

3. 河南理工大学 材料科学与工程学院物理与电子信息学院, 焦作 454000)

摘 要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势方法研究 Co 掺杂 4H-SiC 的电子结构和磁性。计算结果表明: Co 掺杂引入了空穴, 产生自旋极化。Co 掺杂 4H-SiC 的价带顶和导带底分别由 Co 的 3d 态和 C 的 2p 态占据, 而 Si 的 2p 轨道作用较小。通过计算 10 种可能的掺杂位置, 确定了铁磁性最稳定的组态。由于 $\text{Co}_0\text{3d-C:2p-Co}_6\text{3d}$ 链之间存在一定的耦合关系, Co 与 C 原子间强烈的 d-p 轨道杂化使得 Co 掺杂 4H-SiC 处于较稳定的铁磁基态。Co 的引入使得基体空穴增加, 缺陷调节下空穴载流子的远程交换(RKKY)机制导致了铁磁性的出现。

关键词: 稀磁性半导体; 电子结构; 磁性; 第一性原理; 4H-SiC

文章编号: 1004-0609(2017)-10-2114-06

中图分类号: TB333

文献标志码: A

稀磁性半导体是在传统半导体的基础上通过掺杂磁性离子或者非磁性离子而得到。因其兼具磁性和半导体的双重特性而被广泛用于磁感应器、半导体集成电路、半导体激光器等领域^[1], 稀磁性半导体已经成为当前研究热点^[2-3]。碳化硅(SiC)是一种性能优异的宽带隙半导体, 具有化学性质稳定、高击穿强度、高热传导性、高硬度等优点^[4-5], 在高温、高压、高功率器件中被广泛的应用^[6-9]。因此, 对 SiC 的改性研究具有重要的现实意义。

SiC 多以多型体存在, 目前发现的 SiC 多型体有 200 多种, 6H-SiC、4H-SiC、3C-SiC 是比较常见的碳化硅多型体。已有许多研究者从实验对碳化硅材料进行了研究^[10-12], 证实了 SiC 具有优异的性质。本文主要目的是探索 SiC 基稀磁半导体的性质, 这方面实验和理论上的研究也被广泛关注。STROMBERG 等^[13]和 SONG 等^[14]通过实验证实了 Ni、Mn 和 Co 掺杂 6H-SiC 具有铁磁性。LIN 等^[15]通过第一性原理对 Al 掺杂 4H-SiC 的电子结构和磁性进行研究, 提出 Al 本身对磁矩没有贡献, 由于空位载流子的产生才产生微弱的磁性。MIAO 等^[16]计算分析得出 Fe 掺杂 4H-SiC 具有顺磁性。GUBANOV 等^[17]采用了第一性原理研究了 Co 掺杂 3C-SiC, 结果显示 Co 掺杂没有产生磁性。

LOS 等^[18]研究了过渡金属掺杂 4H-SiC 体系, 提出磁性和非磁性都有可能存在, 过渡金属周围的环境起决定性作用。黄国亮等^[19]通过第一性原理研究了过渡金属掺杂 4H-SiC 的总能和磁学性质, 得出 Al 有稳定晶体结构和影响结构磁性的作用, Al 与 Co 共掺杂没有出现铁磁性。WANG 等^[20]通过实验和第一性原理计算方法对缺陷诱导 SiC 铁磁信号进行研究, 提出铁磁信号弱是因为缺陷浓度的相互排斥作用, 即缺陷自旋极化的磁相互作用。因此, 通过过渡金属掺杂对 4H-SiC 进行改性, 能够获得较好的铁磁性, 但对其磁性机理的分析还有待进一步研究。

本文作者选择了与 Si 原子半径(1.46×10^{-10} m)相近的 Co 原子(1.67×10^{-10} m)进行掺杂, 采用第一性原理计算方法, 系统研究 Co 掺杂 4H-SiC 的电子结构与磁性, 进而对 Co 掺杂 4H-SiC 的磁性机理进行解释。

1 计算软件和方法

1.1 计算软件

选用 MS 6.0 中的 CASTEP 软件包进行计算, 此模块是基于密度泛函理论的从头计算量子力学程序。

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51172065, 51372027, 51372026, 51372056)

收稿日期: 2016-09-02; **修订日期:** 2017-04-10

通信作者: 林 龙, 副教授, 博士; 电话: 18539153238; E-mail: linlong@hpu.edu.cn

利用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)^[21], 是目前较准确的电子结构计算方法。采用的赝势是超软赝势, 体系平面波截断能 $E_{\text{cutoff}}=400$ eV, 布里渊区分割特殊点采用 Monkhost-Pack 方案, 采用是 $2 \times 2 \times 2$ 的特殊 K 点对布里渊区求和, 自洽场的收敛精度设为 2×10^{-5} eV, 作用在每个原子上的力最大收敛精度 0.05 eV/Å, 能量计算在倒易空间中进行, 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。

1.2 计算模型

4H-SiC 晶体具有六方纤锌矿结构, 属于 $P6_3mc$ 空间群, 晶格常数是 $a=b=3.078$ Å, $c=10.046$ Å。每个 Si 原子分别与 4 个 C 原子成键, 通过定向的 sp^3 键结合在一起, 构成强四面体, Si 原子位于四面体的中心。本文的计算模型采用的是一个包含 72 个原子的 $3 \times 3 \times 1$ 的超晶胞, 如图 1 所示。由于 Co 的原子半径与 Si 的原子半径相差不大, 用其掺杂并不会导致晶体结构的巨大变化。4H-SiC 基体中的一个 Si 原子被一个 Co 原子替代, 固定第一个掺杂 Co 原子(标记为 Co_0), 再引入第二个掺杂的 Co 原子。考虑到晶体结构的对称性, 对第二个 Co 原子的引入进行了合理的选取, 并进行了必要的标记, 如图 1 所示。

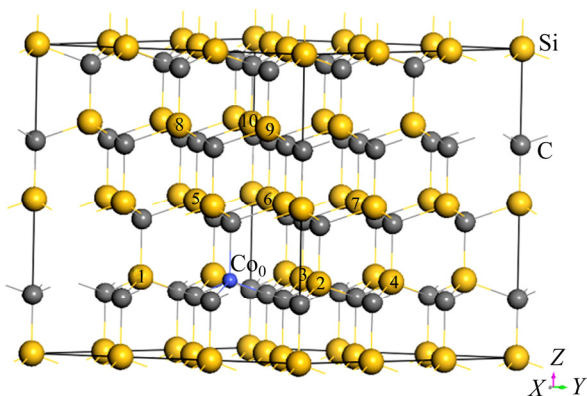


图 1 Co 掺杂 4H-SiC 的 72 原子 $3 \times 3 \times 1$ 超胞模型

Fig. 1 72-atom $3 \times 3 \times 1$ supercell model of Co-doped 4H-SiC (Colored spheres are Si (yellow) and C(gray) atom, respectively. The C atoms labeled by 1–10 are the sites to be replaced by Co atoms)

2 结果与讨论

2.1 单个 Co 掺杂 4H-SiC 的电子结构

在 4H-SiC 超晶胞中, 用一个 Co 原子替代一个 Si

原子, 此时 Co 的掺杂含量为 2.28%, 如图 1 中的 Co_0 所示。计算了 Co 掺杂 4H-SiC 的总态密度和分波态密度, 计算的结果如图 2 所示。从图 2(a)所示总态密度可以看出, 在费米能级附近呈现出较明显的非对称性, 即存在自旋极化现象。通过对图 2(b)~(c)所示分波态密度的分析, 可以看出 Co-3d、Co-3p 和 C-2p 在费米能级附近存在自旋极化。同时从图 2 可以看出, 价带由两个子带组成, 低能区位于 -16 eV 至 -11 eV, 主要是 Si-3s、Si-3p、C-2s 的贡献; 高能区位于 -10 eV 至 0 eV, 电子态主要来自于 Co-3d、Si-3s、Si-3p 和 C-2p 电子轨道的贡献, C-2s 也有少量影响。费米面上方的导带 0 eV 至 1 eV 的电子态主要来自于 Co-3d、Co-3p、C-2p 和 Si-2p 电子轨道的贡献; 费米面上方 2 eV 至 4 eV 的电子态主要来自 Si-3p 电子轨道的贡献, Si-3s、C-2s 和 C-2p 也起到一定的影响, 但是影响较小。

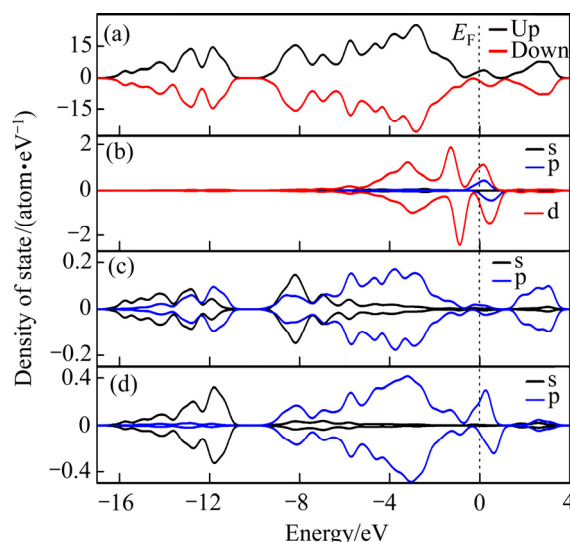


图 2 $Si_{35}CoC_{36}$ 的态密度图

Fig. 2 Total density of states and partial density of states of Co doped 4H-SiC (Vertical dashed line drawn indicates the Fermi energy E_F): (a) TDOS; (b) Co; (c) Si; (d) C

由于掺杂后发生了自旋极化现象, 为了更加清晰的分析材料的电子结构, 图 3 给出了本征 4H-SiC 和 Co 掺杂 4H-SiC 的能带结构图。从图 3(a)可以看出, 4H-SiC 的价带顶位于布里渊区的 G 点; 导带底位于布里渊区的 M 点。价带顶与导带底位于不同点, 所以 4H-SiC 为间接带隙半导体, 禁带宽度值为 1.64 eV, 比实际值 3.63 eV 偏小。禁带宽度变小是 GGA 广义梯度近似方法的普遍结果, 在计算中低估了激发态原子轨道之间的相互作用, 计算结果导致带隙变窄, 但不影响对能带的定性分析。

与本征的 4H-SiC 的能带结构相比较, Co 掺杂后的费米能级进入了价带区域, 如图 3(b)所示, 表明 4H-SiC 转化为 p 型半导体材料, 并且通过对比可以看出, 能带结构中可以容纳的能级数明显增多, 禁带宽度明显减小($E_g=0.681\text{ eV}$)。由于 Co-3d 轨道电子进入带隙, 形成了 0 eV 上方的一小部分局域带, 从而出现了靠近价带顶的杂质能级。同时费米能级进入价带, 形成浅受主能级。杂质 Co 原子的引入改变了 4H-SiC 的电子结构, 价带顶和导带底的能级发生了自旋极化而劈裂, Co、C、Si 能级轨道相互重叠, 增强了相互之间的耦合作用, 这与图 2 所示的 Co 掺杂 4H-SiC 的态密度相互对应。

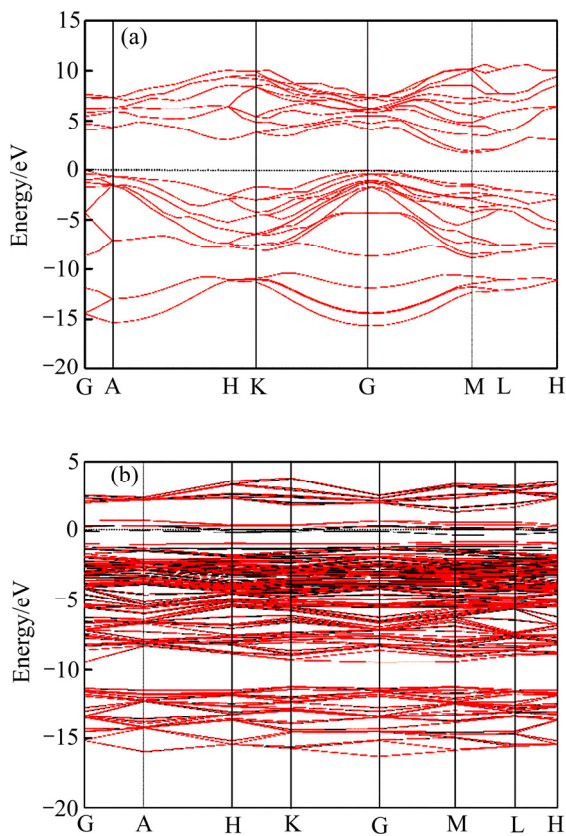


图 3 本征 4H-SiC、Co 掺杂 4H-SiC 的能带结构(费米面被设置在 0 eV)

Fig. 3 Band structure of pure 4H-SiC(a) and Co doped 4H-SiC(b) (Fermi level is set to zero)

2.1 2Co 掺杂 4H-SiC 的电子结构

通过对单个 Co 掺杂 4H-SiC 态密度的分析可以看出, Co 的掺杂能够引起 4H-SiC 的局部磁矩。为了进一步研究 Co 的磁性耦合情况, 本文作者进一步计算了 10 种可能的掺杂结构, 在超晶胞中分别用 2 个 Co 原子替代 2 个 Si 原子, Co 的掺杂含量为 5.56%。固定第一个掺杂的 Co 原子, 被标记为 Co₀, 另一个 Co

原子从 10 个可能位置分别替代 Si 原子, 被标记为 Co₁~Co₁₀, 如图 1 所示。

在进行两个 Co 掺杂 4H-SiC 计算时, 每组要进行两次设定, 即自旋方向相同(铁磁性)和自旋方向相反(反铁磁性)。通过结构优化, 计算其总能和电子结构。表 1 中列出了每个组态 Co-Co 优化前后的距离, 铁磁态与反铁磁态的能量差 $\Delta E_{\text{FM}}(=E_{\text{FM}}-E_{\text{AFM}})$, 以及在铁磁态下 Co 的磁矩。通过表 1 可以看出, 优化前后 Co-Co 距离变化不大, 说明优化结果是合理的。其中(0, 1)、(0, 2)、(0, 3)组态是反铁磁稳定, 其它的都是铁磁稳定, 最稳定的铁磁态是(0, 6)组态, $\Delta E_{\text{FM}}=-27.9\text{ meV}$ 。在各组态中, 所产生的最大磁矩为 0.88 μ_{B} 。在过渡金属(TM)掺杂 4H-SiC 中, 发现铁磁性最强的位置一般会在距离较近的位置, 如 LIN 等^[22]在 Al 与 Fe 共掺 4H-SiC 所提到的那样, 铁磁性最强的位置是在 Fe-Fe 距离最近处。而通过表 1 可以看出, 本研究计算的最优组态是组态(0, 6)处, 可见 Co 与 Co 之间的磁性机理并不是近距离载流子调节的双交换理论。Co 的掺杂引入了缺陷载流子, 可以通过载流子调节的 RKKY 机理和缺陷调节的磁性机理来进行解释。RKKY 机理提出局域电子之间通过传导电子作为媒介而产生耦合, 是一种长程交换机制。本研究与 ZHANG 等^[23]在 Al 与 Co 共掺 4H-SiC 均匀铁磁性体系的研究中结果类似。

表 1 优化前和优化后 Co 掺杂 4H-SiC 的 Co-Co 距离、铁磁态与反铁磁态的能量差 ΔE_{FM} 、铁磁态中 Co 的磁矩

Table 1 Values of Co-Co distance, ΔE_{FM} and magnetic moment on each cell calculated for (a, b) structure Co doped 4H-SiC

(a, b) structure	Co-Co distance/Å		$\Delta E_{\text{FM}}/\text{meV}$	Magnetic moment of Co/ μ_{B}
	Before optimization	After optimization		
(0,1)	3.082	3.047	0.5	0.26
(0,2)	3.082	3.047	0.3	0.26
(0,3)	3.082	3.046	0.5	0.38
(0,4)	5.336	5.349	-18.3	0.72
(0,5)	3.085	3.005	-20.5	0.50
(0,6)	4.360	4.378	-27.9	0.66
(0,7)	5.339	5.362	-22.2	0.88
(0,8)	5.344	5.352	-3.6	0.78
(0,9)	5.344	5.358	-20.4	0.78
(0,10)	5.344	5.358	-17.7	0.78

本研究中进一步计算了(0, 6)组态的总态密度和 Co 原子及其邻近的 Si 和 C 的分态密度, 结果如图 4 所示, 总态密度自旋向上和自旋向下是不对称的, 因此可以判断 Co 掺杂 4H-SiC 体系是有磁性的。价带主要由两个子带组成, 低能区位于 -16 eV 至 -11 eV , 电子态主要是由 Si-3s、Si-3p 和 C-2s 贡献; 高能区位于 -10 eV 至 0 eV , 电子态主要来自于 Co-3d、Si-3s、Si-3p 和 C-2p 电子轨道的贡献。费米面上方导带 0 eV 至 1 eV 的电子态主要来自于 Co-3d、Co-3p、Si-3p 和 C-2p 电子轨道的贡献, 费米面上方 1 eV 至 4 eV 的电子态主要来自 Si-3p 和 Si-3s 电子轨道的贡献。通过与图 2 的比较可以看出, 图 4 中总态密度的费米能级附近呈现出更明显的自旋极化现象, 其主要影响因素是空穴载流子浓度的增加所产生, 空穴载流子是通过 Si^{4+} 被 Co^{2+} 替换引入的。费米能级处出现了 Co-3d、Si-3p 和 C-2p 轨道的杂化作用。Co-3d、Si-3p、C-2p 轨道之间的杂化是由于 $\text{Co}_0:3\text{d}-\text{C}:2\text{p}-\text{Co}_6:3\text{d}$ 链的出现引起的, 使得 Co 掺杂 4H-SiC 中的局域磁矩产生了耦合, 从而形成了铁磁性。

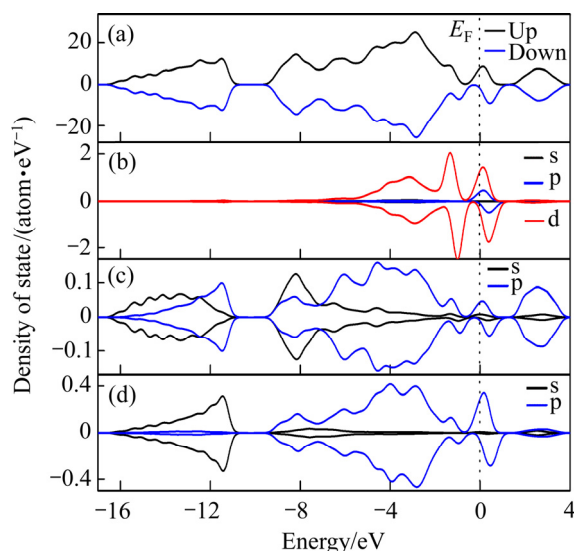


图 4 $\text{Si}_{34}\text{Co}_2\text{C}_{36}$ 的态密度图

Fig. 4 Total density of states and partial density of states of two Co doped 4H-SiC (Vertical dashed line drawn indicates the Fermi energy E_F): (a) TDOS; (b) Co; (c) Si; (d) C

为了更加直观地了解电荷分布及原子成键情况, 对 Co 掺杂 4H-SiC(0, 6)组态的差分电荷密度进行分析, 如图 5 所示。从图 5 可以看出, 自旋密度主要集中在两个 Co 原子的周围, 处于两个 Co 原子中间的 C 原子周围也出现了少量的自旋密度, 此结果与组态(0, 6)的态密度分析结果一致。很明显, 两个 Co 之间的 C

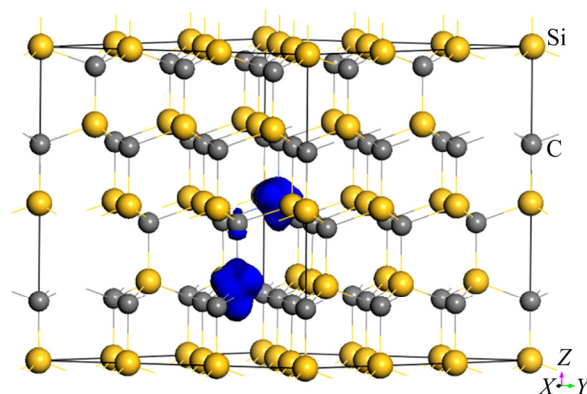


图 5 两个 Co 掺杂 4H-SiC(0,6)组态的铁磁态自旋密度分布图

Fig. 5 Spin density distribution of two Co doped 4H-SiC in FM coupling (Isovalue is set to $0.06\text{ e}/\text{\AA}^3$)

促使形成了 $\text{Co}_0:3\text{d}-\text{C}:2\text{p}-\text{Co}_6:3\text{d}$ 链, 从而使得 Co 掺杂 4H-SiC 产生了铁磁稳定性。

3 结论

1) 通过第一性原理计算研究了 Co 掺杂 4H-SiC 的电子结构, Co^{2+} 替换 Si^{4+} 引入空穴, 有自旋极化现象产生, Co 的引入使得 4H-SiC 产生局域磁矩, 局域磁矩主要是由费米能级处的 Co-3d、Co-3p 和 C-2p 轨道相互作用引起的。

2) 采用平面波赝势方法计算得到纯 4H-SiC 的带隙为 1.64 eV 。Co 掺杂后的费米能级进入了价带区域, 带隙宽度减小为 0.681 eV 。

3) 两个 Co 原子的引入产生了长程耦合, 使得掺杂 4H-SiC 系统铁磁态稳定, 两个 Co 原子局域磁矩通过 $\text{Co}_0:3\text{d}-\text{C}:2\text{p}-\text{Co}_6:3\text{d}$ 链为媒介进行耦合, 产生磁矩为 $0.88\mu_B$ 。缺陷调节下空穴载流子的远程交换(RKKY)机制导致了铁磁性的出现。

REFERENCES

- [1] 赵建华, 邓加军, 郑厚植. 稀磁半导体的研究进展[J]. 物理学进展, 2007, 27(2): 109–150.
ZHAO Jian-hua, DENG Jia-jun, ZHENG Hou-zhi. Diluted magnetic semiconductors[J]. Progress in Physics, 2007, 27(2): 109–150.
- [2] ŽUTIĆ I, FABIAN J, SARMA S D. Spintronics: Fundamentals and applications[J]. Review of Modern Physics, 2004, 76(2):

- 323–410.
- [3] AKINAGA H, OHNO H. Semiconductor spintronics[J]. IEEE Transactions on Nanotechnology, 2002, 99(1): 19–31.
 - [4] ZHENG Liu, ZHANG Feng, LIU Sheng-bei, DONG Lin, LIU Xing-fang, FAN Zhong-chao, LIU Bin, YAN Guo, WANG Lei, ZHAO Wan-shun, SUN Guo-sheng, HE Zhi, YANG Fu-hua. High-performance 4H-SiC junction barrier Schottky diodes with double resistive termination extensions[J]. Chinese Physics B, 2013, 22(9): 97302.
 - [5] THAKORE B Y, KHAMBHOLJA S G, VAHORA A Y, BHATT N K, JANI A R. Thermodynamic properties of 3C-SiC[J]. Chinese Physics B, 2013, 22(10): 106401.
 - [6] SONG Qing-wen, ZHANG Yu-Ming, HAN Ji-Sheng, TANNER P, DIMITRIJEV S, ZHANG Yi-men, TANG Xiao-yan, GUO Hui. The fabrication and characterization of 4H-SiC power UMOSFETs[J]. Chinese Physics B, 2013, 22(2): 27302.
 - [7] PABST O, SCHIFFER M, OBERMEIER E, TEKIN T, LANG K D, NGO H D. Measurement of Young's modulus and residual stress of thin SiC layers for MEMS high temperature applications[J]. Microsystem Technologies, 2012, 18(7/8): 945–953.
 - [8] HASSAN M. Electrostatically actuated 3C-SiC MEMS for frequency mixing[J]. Journal of Mechatronics, 2012, 1(1): 21–24.
 - [9] LIN C, AGARWAL A K, DHAR S, RYUS H, PALMOUR J W. Static performance of 20 A, 1200 V 4H-SiC power MOSFETs at temperatures of 187 °C to 300 °C [J]. Journal of Electronic Materials, 2012, 41(5): 910–914.
 - [10] 刘政潭, 蔡旭升, 李国强. 高性能 SiC 增强 Al 基复合材料的显微组织和热性能 [J]. 中国有色金属学报, 2013(4): 1040–1046.
LIU Mei-tan, CAI Xu-sheng, LI Guo-qiang. Microstructure and thermal properties of high performance SiC reinforced Al matrix composite[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2013(4): 1040–1046.
 - [11] 苏哲安, 杨 鑫, 黄启忠, 黄伯云, 李建立, 张明瑜, 谢志勇. SiC 涂层对 C/C 复合材料高温氧乙炔焰烧蚀性能影响[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(11): 2838–2845.
SU Zhe-an, YANG Xin, HUANG Qi-zhong, HUANG Bai-Yun, LI Jian-li, ZHANG Ming-yu, XIE Zhi-yong. Effect of SiC coating on ablation resistance of C/C composites under oxyacetylene torch flame[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(11): 2838–2845.
 - [12] 赵剑峰, 袁 鑫. 激光照射原位生成 SiC 晶须的晶须形态[J]. 中国有色金属学报, 2012, 22(2): 490–495.
ZHAO Jian-feng, YUAN Xin. Morphology of SiC whisker insitu growth by laser irradiation[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2012, 22(2): 490–495.
 - [13] STROMBERG F, KEUNE W, CHEN X, BEDANTAS, REUTHER H, MÜCKLICH, A. The origin of ferromagnetism in ⁵⁷Fe ion-implanted semiconducting 6H-polytype silicon carbide[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2006, 18(43): 9881.
 - [14] SONG Bo, BAO Hui-qiang, HUI Li, LEI Ming, JIAN Ji-kang, HAN Jie-cai, ZHANG Xing-hong, MENG Song-he, WANG Wan-yan, CHEN Xiao-long. Magnetic properties of Mn-doped 6H-SiC[J]. Applied Physics Letters, 2009, 94(10): 102508.
 - [15] LIN X, PAN F. The electronic structures and magnetism in Al doped 4H-SiC: The first-principles calculation[J]. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2014, 27(6): 1513–1516.
 - [16] MIAO M S, LAMBRECHT W R. Electronic structure and magnetic properties of transition-metal-doped 3C and 4H silicon carbide[J]. Physical Review B, 2006, 74(23): 235218.
 - [17] GUBANOV V A, BOEKEMA C, FONG C Y. Electronic structure of cubic silicon-carbide doped by 3d magnetic ions[J]. Applied Physics Letters, 2001, 78(2): 216–218.
 - [18] LOS A, LOS V. Magnetic states of transition metal impurities in silicon carbide[J]. J Phys Condens Matter, 2009, 21(20): 206004.
 - [19] 黄国亮, 张志华, 陶华龙. 4H-SiC 基稀磁半导体的电子结构[J]. 大连交通大学学报, 2013, 34(3): 74–78.
HUANG Guo-liang, ZHANG Zhi-hua, TAO Hua-long. Study of electronic structure of 4H-SiC based diluted magnetic semiconductor[J]. Journal of Dalian Jiaotong University, 2013, 34(3): 74–78.
 - [20] WANG Y T, LIU Y, WENDLER E, WANG G, CHEN X L, TONG W, YANG Z R, MUNNIK F, BUKALIS G, CHEN X L, GEMMING S, HELM M, ZHOU S Q. Defect-induced magnetism in SiC: Why the ferromagnetic signal is weak?[J]. arXiv:1501.01096. 2015.
 - [21] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple[J]. Physical Review Letters, 1996, 77(18): 3865–3868.
 - [22] LIN Long, ZHANG Zhi-hua, TAO Hua-long, HE Ming, HUANG Guo-liang, SONG Bo. Density functional study on ferromagnetism in (Al, Fe)-codoped 4H-SiC[J]. Computational Materials Science, 2014, 87: 72–75.
 - [23] ZHANG X H, HAN J C, ZHOU J G, XIN C, ZHANG Z H, SONG B. Ferromagnetism in homogeneous (Al, Co)-codoped 4H-silicon carbides[J]. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2014, 363: 34–42.

First-principles calculations of electronic structures in Co doped 4H-SiC

LIN Long^{1,2}, Zhu Ling-hao¹, LI Xian-hong¹, ZHANG Zhi-hua², He Ming¹, TAO Hua-long²,
XU Yong-hao³, ZHANG Zhan-ying¹, CAO Jian-liang¹

(1. Cultivating Base for Key Laboratory of Environment-Friendly Inorganic Materials in Henan Province,
School of Materials Science and Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China;

2. Liaoning Key Materials Laboratory for Railway, School of Materials Science and Engineering,
Dalian Jiaotong University, Dalian 116028, China;

3. School of Physics & Electronic Information Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, China)

Abstract: Electronic and magnetic properties of Co doped 4H-SiC are researched by use of the first-principle plane wave pseudo-potential method based on density functional theory. Ten kinds of doping position were calculated and the most stable configuration was found out. The calculation results show that spin-polarization appears in one Co atom doped 4H-SiC, which is due to the introduction of vacancy. The top of valence band and the bottom of the conduction band are mainly contributed by Co-3d, C-2p orbitals, with small contribution of Si-2p. Ferromagnetism order is activated by Co doping via a $\text{Co}_0\text{:3d-C:2p-Co}_6\text{:3d}$ coupling chain. Hybridization occurs between p-d orbitals. The doped Co ion will induce additional holes carrier into the 4H-SiC. Therefore, the mechanisms for stabilizing the ferromagnetic state in Co doped 4H-SiC based on defect interaction and Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) interaction.

Key words: dilute magnetic semiconductors; electronic structure; magnetism; first principle; 4H-SiC

Foundation item: Projects(51172065, 51372027, 51372026, 51372056) supported by the National Natural Science Foundation of China

Received date: 2016-09-02; **Accepted date:** 2017-04-10

Corresponding author: LIN Long; Tel: +86-18539153238; E-mail: linlong@hpu.edu.cn

(编辑 何学锋)