

# Estudio teórico del ferromagnetismo en la superred $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$

## Theoretical study of ferromagnetism in $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ superlattice

Rafael González-Hernández, Ph.D.<sup>1\*</sup>, W. López-Pérez. Ph.D.<sup>2</sup>, J.A. Rodríguez Martínez Ph.D.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Docente Investigador. Departamento de Física, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia. \* rbernandezj@uninorte.edu.co

<sup>2</sup>Docente Investigador. Departamento de Física, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia.

<sup>3</sup>Docente Investigador. Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

Fecha de recepción del artículo: 07/10/2011 Fecha de aceptación del artículo: 03/08/2012

### Resumen

Usando métodos de primeros principios y basados en la técnica de ondas planas aumentadas y linealizadas (LAPW), se investigaron las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ , en la fase wurtzita por ser la configuración más estable del GaN. Los efectos de intercambio y correlación se trataron empleando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA), implementada en la parametrización de Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE). A partir de los cálculos de la energía total, se encontró que el estado ferromagnético (FM) es energéticamente más estable, comparado con los estados no-magnético (NM) y antiferromagnético (AFM). El ferromagnetismo ocurre a pesar de que el átomo de vanadio no, es un átomo magnético en su fase natural. En el volumen de equilibrio, el sistema en el estado del ferromagnético, posee un momento magnético total de  $2 \mu_B$  por supercelda. Además, el cálculo de la estructura de bandas y densidad de estados, indican que este sistema posee comportamiento electrónico tipo half-metallic, donde los electrones conducción presentan un 100% de polarización de espín en el nivel de Fermi. Este es un resultado importante pues la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$  puede ser potencialmente útil en la fabricación de inyectores de espín a otros materiales como el ZnO o el mismo GaN.

### Palabras claves

Propiedades magnéticas, Superredes, LAPW, GaN.

### Abstract

Using first principles calculations by means the Linearized Augmented Plane Wave (LAPW) method the structural, electronic and magnetic properties of  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$  superlattice in wurtzite structure have been investigated. The exchange and correlation effects were treated using the Generalized Gradient Approximation (GGA) with the Perdew, Burke and Ernzerhof parameterization (PBE). By total energy calculations it was found that ferromagnetic state (FM) is energetically more stable than nonmagnetic (NM) and antiferromagnetic (AFM) states. The ferromagnetism is presented although that vanadium atom is not a magnetic atom. In the equilibrium volume, a total moment magnetic of  $2 \mu_B$ /supercell was found in the ferromagnetic state. Also, it was found that the system possesses behaviour electronic type half-metallic, where conduction electrons conduction presents 100% of spin polarization in the Fermi level. This makes this superlattice potentially useful for spin injection into ZnO or the same GaN.

## Key words

Magnetic properties, Superlattices, LAPW, GaN

## 1. Introducción

Para ayudar al entendimiento y el control de los nuevos materiales en la industria, los estudios teóricos se han convertido en una parte fundamental del diseño de los nuevos dispositivos. Recientemente, el diseño y fabricación de nuevos semiconductores que integran el magnetismo a los dispositivos electrónicos convencionales, son uno de los grandes desafíos en el área de la nanotecnología. Esto se debe principalmente, a que el magnetismo ha desempeñado un papel fundamental en el almacenamiento de información desde la construcción de las primeras computadoras, y se anticipan aumentos dramáticos de la capacidad de almacenamiento con este tipo de nuevos materiales.

Los semiconductores magnéticos (SM), semiconductores dopados con átomos magnéticos, están siendo investigados aceleradamente para el desarrollo de dispositivos en espintrónica. Mientras se han realizado muchos trabajos enfocados en materiales III-V, principalmente (In,Mn)As y (Ga,Mn)As, sus temperaturas de Curie  $T_c=90\text{K}$  para (In,Mn)As [1] y  $T_c=172\text{K}$  para (Ga,Mn)As [2] son demasiado bajas para aplicaciones prácticas. La fabricación de dispositivos móviles, requerirá el desarrollo de semiconductores que puedan mantener sus propiedades ferromagnéticas, a temperaturas cercanas a la temperatura ambiente. De manera que en los últimos años, la comunidad científica se ha enfocado en estudiar tanto teórica como experimentalmente, semiconductores magnéticos alternativos en vías de desarrollo de dispositivos que trabajen a temperaturas de Curie más altas [3]. Resulta entonces muy atractivo, desde el punto de vista teórico, estudiar el semiconductor (Ga,V)N, debido a que sus propiedades magnéticas se encuentran íntimamente relacionadas con su estructura electrónica. En el presente trabajo, se investigó el efecto estructural, electrónico y magnético de la sustitución de átomos de Vanadio (V) en la matriz de nitruro de galio (GaN) en una configuración de superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ .

## 2. Método

Para el estudio teórico de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ , se construyó una supercelda wurtzita, compuesta por ocho planos atómicos en una configuración  $1 \times 3$  formada por 1 capa de V y 3 capas de Ga, separadas por 4 capas de N en la dirección [0001] como se muestra en la Figura 1. Los cálculos se realizaron en el marco de la teoría de la densidad funcional (DFT). Las ecuaciones de Kohn-Sham se resolvieron sin tener en cuenta polarización de espín para el caso no magnético (NM) y para ambas polarizaciones de espín en los casos de acople ferromagnético (FM) y antiferromagnético (AFM) entre los átomos de Vanadio en la superred. Para solucionar las ecuaciones se empleó el método de ondas planas aumentadas y linealizadas en su versión de potencial total (FP-LAPW), tal como está implementado en el código WIEN2k [4]. En los efectos de intercambio y correlación se empleó la aproximación del gradiente generalizado (GGA) de Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE) [5]. Para lograr la convergencia en los valores propios de la energía, la función de onda en la región intersticial se expandió en ondas planas hasta el valor de corte  $R_{MT} \cdot K_{max} = 8$ , donde  $K_{max}$  es el máximo módulo de los vectores en el espacio recíproco y  $R_{MT}$  es el radio de esfera atómica más pequeño. Los radios de las esferas atómicas seleccionados fueron:  $R_{Ga} = 1.80$  bohr,  $R_V = 1.70$  bohr y  $R_N = 1.60$  bohr. Además, se seleccionaron 50 puntos  $\mathbf{k}$  en la parte irreducible de la primera zona de Brillouin para todos los casos.

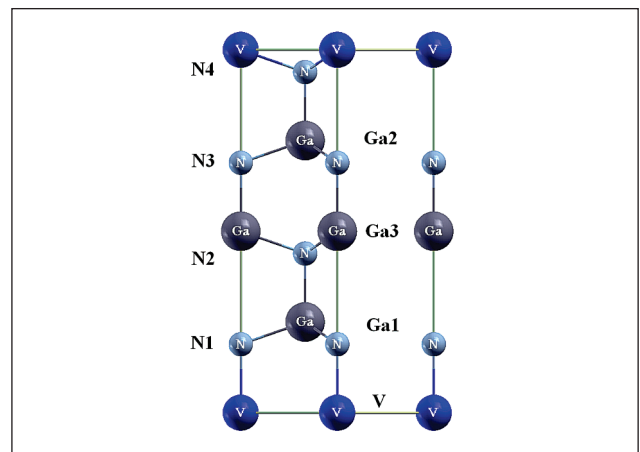
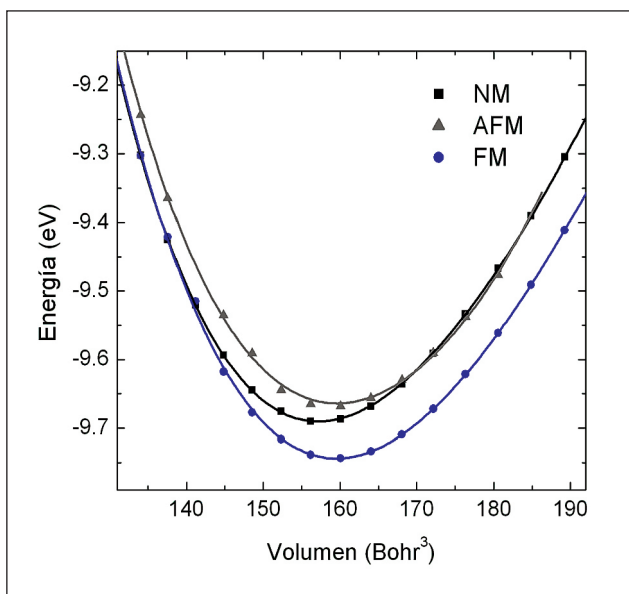


Figura 1. Celda unitaria de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ .

### 3. Propiedades estructurales y magnéticas

En la Figura 2, se muestra la curva de energía total contra volumen calculada para diferentes configuraciones magnéticas de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$  y ajustadas a la ecuación de estado de Murnaghan [6]. Se observa que el acople FM entre los átomos de V, es el estado más estable para la superred, pues posee una energía 0.077 eV mas baja que en el estado AFM. El resumen de los resultados estructurales para cada una de las configuraciones magnéticas, se muestra en la Tabla 1.



**Figura 2.** Energía vs volumen para las configuraciones NM, AFM y FM de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ .

Para entender el mecanismo que estabiliza el estado FM en la superred, en la Tabla 2 se muestra la magnetización parcial de cada uno de los átomos correspondientes a la Figura 1 en el estado FM,

**Tabla 1.** Propiedades estructurales de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ .

	a (bohr)	$V_0(\text{bohr}^3)$	B(GPa)	$E_0(\text{eV})$	$\Delta E(\text{eV})$
NM	6.066	157.43	177.6	-9.689	0.052
AFM	6.091	159.38	174.6	-9.664	0.077
FM	6.097	159.86	171.6	-9.741	-

calculados con los parámetros de equilibrio de la Tabla 1. Se observa que el átomo de V induce una magnetización finita en los átomos vecinos de N, en especial sobre el átomo de N1, lo cual indica la existencia de una fuerte hibridación entre los estados  $d$ -V y los estados  $p$ -N1. Además, se presenta una suave hibridación en los estados  $p$ -N1 y  $p$ -Ga1, que induce una pequeña magnetización en el átomo de Ga1. La hibridación  $p$ - $d$  a corto alcance, es la responsable del acople FM entre los átomos de V en la superred.

### Conclusiones

Mediante cálculos de primeros principios, utilizando el método de ondas planas aumentadas y linealizadas en su versión de potencial total, se estudiaron las propiedades estructurales, electrónica y magnéticas de la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$  en una configuración wurtzita. En conclusión, se muestra que la configuración FM es la más estable energéticamente, debido a la fuerte hibridación  $p$ - $d$  entre los átomos de V y N. Además, se encuentra que en el estado FM, la superred exhibe un comportamiento tipo half-metallic, debido a que presenta una brecha de separación energética en su estructura de bandas para los estados de espín minoritarios y es metal para los estados de espín mayoritarios. Esto indica que esta superestructura puede ser potencialmente útil en la fabricación de dispositivos de inyección de espín para espintrónica.

**Tabla 2.** Momento magnético total y local (en  $\mu_B/\text{celda}$ ) para la superred  $(\text{VN})_1/(\text{GaN})_3$ .

	Total	V	N1	N2	N3	N4	Ga1	Ga2	Ga3	Int
AFM	0.000	1.424	-0.089	0.005	0.004	0.001	0.012	0.004	0.000	0.000
FM	2.000	1.428	-0.094	0.006	0.006	-0.002	0.013	0.004	0.001	0.637

## Agradecimientos

Los autores desean agradecer el apoyo financiero al Departamento de Física de la Universidad del Norte. También se desea dar un agradecimiento especial al Doctor Peter Blaha y su equipo de trabajo (Vienna University of Technology Inst. of Physical and Theoretical Chemistry, Getreidemarkt 9/156, A-1060 Vienna/Austria). Los cálculos se realizaron en el cluster *Hiperlab* de Ciencias Básicas en la Universidad del Norte (Barranquilla, Colombia).

## Referencias

1. Schallenberg, T. and Munekata H. (2006). *Appl. Phys. Lett.* 89, 042507.
2. Nazmul A M, Sugahara S and Tanaka M. (2003). *Phys. Rev. B* 67, 241308.
3. Chambers S A. (2006). *Surf. Sci. Rep.* 61, 345.
4. Blaha, P.; Schwarz, K.; Madsen, G.; Kvasnicka, D. & Luitz, J. (2001). *WIEN2k*, An augmented plane wave plus local orbitals program for calculating crystal properties. ISBN 3-9501031-38-1-2.
5. Perdew, J.; Burke, K. y Ernzerhof, M. (1996). *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865.
6. Murnaghan, F.D. (1944). *Proc. Natl. Acad. Sci, USA* 30, 244.