

文章编号: 1000-7032(2009)05-0702-04

稀磁半导体材料居里温度的极值点

陈 余, 关玉琴*, 赵春旺

(内蒙古工业大学 理学院物理系, 内蒙古 呼和浩特 010051)

摘要: 以 Zener 模型为基础, 考虑反铁磁性交换作用对 DMS 材料居里温度的影响, 理论计算得到了居里温度关于掺杂浓度和反铁磁性交换作用的二元函数, 对 GaAs: TM (Ga, TM)As ($TM = \text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni}$) 的居里温度做了详细分析得到: n 型半导体居里温度有一个极大值, 而 p 型掺杂是单调的递增。

关键词: 稀磁半导体; 居里温度; 掺杂浓度; 反铁磁性交换作用

中图分类号: O472.5

PACS: 75.50.Pp; 75.30.Kz

PACC: 7550P; 7530K

文献标识码: A

1 引 言

所谓稀磁半导体(Diluted Magnetic Semiconductor, DMS), 是指磁性过渡金属或稀土金属离子部分取代化合物半导体的非磁性阳离子而形成的化合物。在非磁半导体中掺入微量的磁性原子会改变半导体的某些性质, 使其呈现出一定的磁性, 从而形成稀磁半导体(DMS)。其中被掺入的磁性原子称作磁性杂质, 非磁半导体称作基质。通常所说的 DMS 是指 II-VI 族、IV-VI 族、II-V 族或 III-V 族化合物中, 由磁性过渡族金属离子或稀土金属离子部分地代替非磁性阳离子而形成的一类新的半导体材料。稀磁半导体材料在同一器件上结合了凝聚态的两大分支: 半导体(利用电子电荷的自由度)和存储材料(利用电子自旋的自由度)^[1,2]。也有许多人研究声子之间相互作用对半导体材料性能的影响^[3,4]。

从工业应用的角度, 只有合成出居里温度 T_c 高于室温的稀磁半导体(DMS)材料才具有实用价值。最近, Kato 等人通过理论计算预测在 Cr 和 Mn 掺杂的 GaAs 的 DMS 中, 将可能出现较高的居里温度 T_c , 理论上预测 GaAs 是一种能获得高居里温度的材料^[5]。Dietl 等人根据 Zener 的磁性模型在实验上已经证实了居里温度随着磁性离子浓度以及 DMS 中空穴浓度的增加而增加, 并且给出居里温度满足的关系式^[6,7]。这就是本文以 GaAs

为例, 推导出考虑反铁磁性交换作用下 DMS 材料居里温度计算表达式的初衷。

2 模型选取

2.1 Zener 模型

Zener 的磁性模型下的居里温度满足如下关系^[5]:

$$T_c = Cxp^{1/3} \quad (1)$$

其中 x 为 TM 离子的浓度, p 为空穴浓度, C 是与基质材料有关的常数。

在此模型中, 只考虑了掺杂浓度和空穴浓度对居里温度 T_c 的影响, 忽略了反铁磁性交换作用对 T_c 的影响。

2.2 反铁磁性交换作用对稀磁半导体(DMS)居里温度的影响

反铁磁交换作用对居里温度的具体影响程度由下面的函数来表示^[6]:

$$\frac{T_c}{T_{c_0}} = \sqrt{1 + \frac{7}{12}ky^2} - \sqrt{\frac{7}{12}ky^2} \quad (2)$$

其中 T_{c_0} 与 T_c 分别为不考虑和考虑反铁磁性交换作用时的居里温度, k 为磁性离子浓度与空穴浓度的比值, y 为反铁磁性交换作用的相对强弱。

2.3 居里温度计算表达式的理论推导

表达式(1)中, 忽略了反铁磁性交换作用对居里温度的影响, 并且把居里温度 T_c 表示为掺杂浓度 x 和空穴浓度 p 的二元函数, 但实质上空穴

收稿日期: 2009-01-25; 修订日期: 2009-06-24

基金项目: 国家自然科学基金(10862002); 内蒙古工业大学基金(X200930)资助项目

作者简介: 陈余(1985-), 男, 四川内江人, 主要从事半导体材料的研究。

*: 通讯联系人; E-mail: gyqzlf@sohu.com

浓度 p 是由掺杂浓度和掺杂类型决定的。表达式(2)给出了考虑反铁磁性交换作用与不考虑反铁磁性交换作用时居里温度的相对大小,用反铁磁性交换作用的相对强弱 y 以及磁性离子浓度与空穴浓度的比值 k 的二元函数表示。同样的,磁性离子浓度与空穴浓度的比值也是由掺杂浓度和掺杂类型决定的。

以3d过渡金属取代GaAs中Ga位置为例来具体推导一般情况下的居里温度 T_c 关于掺杂浓度 x 和反铁磁性交换作用相对强弱 y 的二元函数。(其余掺杂元素、取代位置、基质材料可作同样的分析)。为了使理论计算具有实用价值,在室温(300 K)下计算。先做如下假设,可以证明^[7],这些假设都是科学的、合理的:

1. 记GaAs材料的Ga原子数密度为 N ,本征载流子浓度为 n_0 。

2. 掺杂过渡金属TM的浓度为 x ,TM的价电子数为 S ,掺入的TM完全取代GaAs中Ga的位置。

3. 掺杂的过渡金属TM在室温下处于强电离温度区^[8],掺入的过渡金属完全电离,忽略本征激发,此时的多子浓度等于过渡金属电离所产生的多子浓度。

本征的GaAs材料中,Ga提供3个价电子,

设掺杂的TM离子提供的价电子数为 S ,在 S 不同时将得到不同的掺杂类型。分三类情况计算不同过渡金属掺杂时的空穴浓度 p 以及磁性离子浓度与空穴浓度的比值 k 。

I. 当 $S < 3$ 时,得到的是p型掺杂,此时 p 和 k 分别为:

$$p = Nx(3 - S) \tag{3}$$

$$k = \frac{Nx}{p} = (3 - S)^{-1} \tag{4}$$

II. 当 $S = 3$ 时,得到的是本征型掺杂:

$$p = n_0 \tag{5}$$

$$k = \frac{Nx}{p} = Nx n_0^{-1} \tag{6}$$

III. 当 $S > 3$ 时,得到的是n型掺杂:

$$p = \frac{n_0^2}{Nx(S - 3)} \tag{7}$$

$$k = Nx/p = (Nx/n_0)^2(S - 3) \tag{8}$$

由式(1)、(3)、(5)、(7)可以将不考虑反铁磁性交换作用时的居里温度用下面的函数表示:

$$T_{c_0} = Cxp^{1/3} = \begin{cases} Cx[Nx(3 - S)]^{1/3}, & S < 3 \\ Cxn_0^{1/3}, & S = 3 \\ Cx\left[\frac{n_0^2}{Nx(S - 3)}\right]^{1/3}, & S > 3 \end{cases} \tag{9}$$

综合式(2)、(4)、(6)、(8)、(9)可得:

$$T_c = \left(\sqrt{1 + \frac{7}{12}ky^2} - \sqrt{\frac{7}{12}ky^2} \right) T_{c_0} = \begin{cases} \left(\sqrt{1 + \frac{7}{12}y^2(3 - S)^{-1}} - \sqrt{\frac{7}{12}y^2(3 - S)^{-1}} \right) Cx[Nx(3 - S)]^{1/3}, & S < 3 \\ \left(\sqrt{1 + \frac{7}{12}y^2Nx(n_0)^{-1}} - \sqrt{\frac{7}{12}y^2Nx(n_0)^{-1}} \right) Cxn_0^{1/3}, & S = 3 \\ \left(\sqrt{1 + \frac{7}{12}y^2\left(\frac{Nx}{n_0}\right)^2(S - 3)} - \sqrt{\frac{7}{12}y^2\left(\frac{Nx}{n_0}\right)^2(S - 3)} \right) Cx\left[\frac{n_0^2}{Nx(S - 3)}\right]^{1/3}, & S > 3 \end{cases} \tag{10}$$

3 结果与讨论

根据以上分析,n型掺杂情况下 T_c 关于 x 的变化将不再是单调函数,会出现一个极大值;而p型掺杂则是单调的递增。从图(1~4)可以看出n型掺杂时 T_c 关于 x 的精细变化。

对此变化可由n型掺杂时 T_c 的表达式给出解释,把式(10)中n型掺杂时的 T_c 提取出来,见下式:

$$T_c = \left(\sqrt{1 + \frac{7}{12}y^2\left(\frac{Nx}{n_0}\right)^2(S - 3)} - \sqrt{\frac{7}{12}y^2\left(\frac{Nx}{n_0}\right)^2(S - 3)} \right) Cx\left[\frac{n_0^2}{Nx(S - 3)}\right]^{1/3}, S > 3 \tag{11}$$

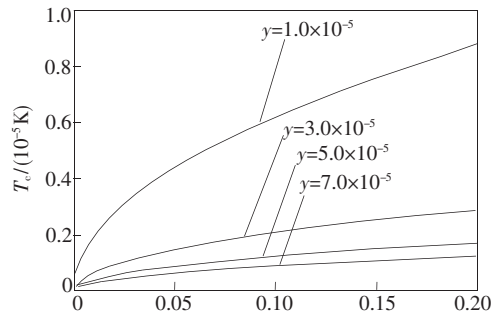


图1 (Ga,Ti)As的居里温度

Fig.1 The Curie temperature of (Ga, Ti)As

式(11)对 x 求偏导,并且令 $\frac{\partial T_c}{\partial x} = 0$,可得:

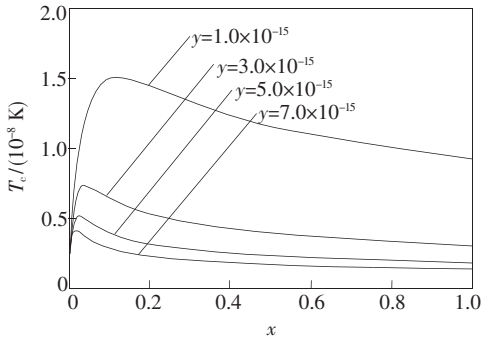


图 2 (Ga, V)As 的居里温度

Fig. 2 The Curie temperature of (Ga, V)As

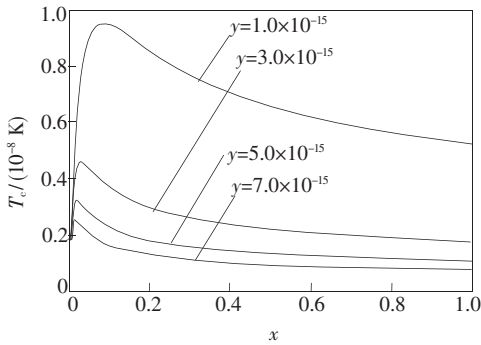


图 3 (Ga, Co)As 的居里温度

Fig. 3 The Curie temperature of (Ga, Co)As

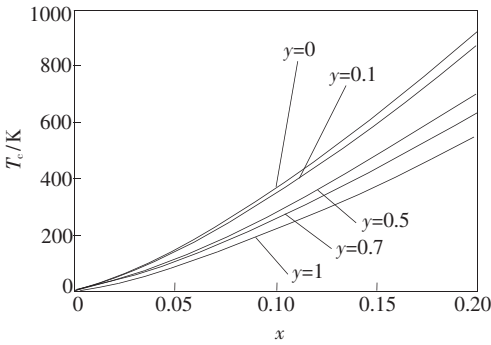


图 4 (Ga, Ni)As 的居里温度

Fig. 4 The Curie temperature of (Ga, Ni)As

$$\left(\frac{\frac{4}{3}x^{1/3} + \frac{10}{3} \times \frac{7}{12} \left(\frac{N}{n_0}\right)^2 (S-3)y^2 x^{7/3}}{2\sqrt{x^{4/3} + \frac{7}{12} \left(\frac{N}{n_0}\right)^2 (S-3)y^2 x^{10/3}}} - \frac{\frac{10}{3} \times \frac{7}{12} \left(\frac{N}{n_0}\right)^2 (S-3)y^2 x^{7/3}}{2\sqrt{\frac{7}{12} \left(\frac{N}{n_0}\right)^2 (S-3)y^2 x^{10/3}}} \right) = 0 \quad (12)$$

令 $t = \frac{7}{12} \left(\frac{N}{n_0}\right)^2 (S-3)y^2 x^2$, 再整理、化简式(12)

得 $t = \frac{4}{5}$, 所以

$$\frac{7}{12} \left(\frac{N}{n_0}\right)^2 (S-3)y^2 x^2 = \frac{4}{5}$$

由于 x, y 的取值范围均为 $[0, 1]$, 上式取合理值得:

$$x = \sqrt{\frac{48}{35} (S-3)^{-1} n_0 N^{-1} y^{-1}} \quad (13)$$

式(13)决定的 x 就是居里温度 T_c 达到最大值时的掺杂浓度, 不妨记为 x_0 。

4 结 论

当 $x < x_0$ 时, T_c 随 x 上升; 当 $x = x_0$, T_c 达到极大值; 当 $x > x_0$ 时, T_c 随 x 下降。在 y 逐渐增加的过程中, 临界掺杂浓度 x_0 随 y 按式(13)逐渐的减小, 并且居里温度 T_c 也在整体降低, 这个变化规律由图(1~4)可以明显地看出来。这里再次说明了 n 型掺杂时居里温度很低的原因: n 型掺杂时, 随着掺杂浓度 x 的增加, 当掺杂浓度 x 超过临界掺杂浓度 x_0 时, 居里温度随 x 的增加而下降, 得到的居里温度更低。

GaAs 材料中, n_0 的取值在 10^6 量级, N 的取值在 10^{22} , 由式(13)可知, 要想观察到居里温度 T_c 的这个极值点, y 的取值需控制在 10^{-15} 的数量级。

参 考 文 献:

- [1] Onho H. Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic [J]. *Science*, 1999, **281**(5379):951-956.
- [2] Onho H. Toward functional spintronic [J]. *Science*, 2001, **291**(5505):840-841.
- [3] Chen Shihua, Xiao Jinglin. Properties of strong coupling bound polaron in parabolic quantum dot [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2007, **28**(1):23-27 (in Chinese).
- [4] Zhang Peng, Xiao Jinglin. Influence of interaction between phonons on properties of polaron in a quantum dot [J]. *Chin. J. Lumin.* (发光学报), 2007, **28**(1):35-38 (in Chinese).
- [5] Li Dong, Wang Yunbo, Yu Jun, et al. Recent development on diluted magnetic semiconductors [J]. *J. Funct. Mater.*

(功能材料), 2004, **35**(z1):1110-1115 (in Chinese).

- [6] Hideo Ohno. Properties of ferromagnetic III-V semiconductors [J]. *J. Magn. Magn. Mater.*, 1999, **200** (1-3): 110-129.
- [7] Dietl T, Ohno H, Matsukura F, *et al.* Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors [J]. *Science*, 2000, **287**(5455):1019-1022.
- [8] Hu Zuoqi, Chen Fei. Influence of anti-ferromagnetic exchange interaction on the Curie temperature of DMS [J]. *J. Magnetic Materials and Devices* (磁性材料及器件), 2007, **38**(1):21-24 (in Chinese).

Curie Temperature of Diluted Magnetic Semiconductor Material under The Anti-ferromagnetic Exchange

CHEN Yu, GUAN Yu-qin, ZHAO Chun-wang

(Department of Physics, Inner Mongolia University of Technology, Hohhot 010051, China)

Abstract: Mixing small amount of the magnetic transition metal or rare earth metal ions in the non-magnetic semiconductor makes it show a certain degree of magnetism, forming the diluted magnetic semiconductors (DMS). The introduction of one of the magnetic atoms, as known magnetic impurities, into the matrix as known the non-magnetic semiconductor.

In this paper based on Zener model, considering the impact of the anti-ferromagnetic exchange on the Curie temperature of DMS materials, we got the function of the doping concentration and anti-ferromagnetic exchange about Curie temperature (T_c). A detailed analysis on the Curie temperature of (GaAs: TM) ($TM = \text{Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni}$) was carried out. A conclusion was drawn from the analysis. It follows: when $x < x_0$, T_c increases with x ; when $x = x_0$, T_c reaches maxima; when $x > x_0$, T_c always decreases with x increasing. At the same time the critical doping concentration x_0 decreases gradually with y , and Curie temperature T_c always is lower. For n-type doping cases, T_c is no longer a monotone function for the x , there is a maximum value only, however, for the p-type doping T_c displays a monotonous increase.

Key words: diluted magnetic semiconductor; Curie temperature; dope concentration; anti-ferromagnetic exchange

CLC number: O472.5

PACS: 75.50.Pp; 75.30.Kz

PACC: 7550P; 7530K

Document code: A