

Cálculos *ab initio* do Semicondutor Magnético Diluído Ga_{1-x}Mn_xN: elaboração do modelo da supercélula.

Marcilene Cristina Gomes Maluf¹(PG), José Humberto Dias da Silva²(PQ), Douglas Marcel Gonçalves Leite²(PG) Júlio Ricardo Sambrano¹(PQ), Aguinaldo Robinson de Souza¹(PQ). marcilenemaluf@fc.unesp.br

¹Grupo de Modelagem e Simulação Molecular – FC/UNESP, 17033-360, Bauru - SP, Brazil, ²Grupo de Materiais Avançados – FC/UNESP, 17033-360, Bauru - SP, Brazil

Palavras Chave: Supercélula, Spintrônica, DFT, Ga_{1-x}Mn_xN.

Introdução

Nos últimos anos as propriedades ferromagnéticas em alguns semicondutores magnéticos diluídos (DMS) têm sido investigadas tanto pelo interesse acadêmico, no entendimento do ferromagnetismo, como na obtenção de novos dispositivos tecnológicos que combinem a carga e o spin do elétron (spintrônica). Previsões teóricas e resultados experimentais recentes, indicam que o material Ga_{1-x}Mn_xN, dopado (tipo-p), pode apresentar ordenamento ferromagnético a temperaturas ambiente. Esta classe de materiais tem um grande potencial para aplicações em dispositivos semicondutores como, por exemplo, em memória magnética de acesso randômico, spin-diodo, spin-transistor e sensores magnéticos. Os DMSs apresentam também possíveis aplicações em computação quântica na qual possibilitaria uma melhor integração entre os sistemas de processamento, memória e armazenamento de dados. Outro benefício da utilização de dispositivos baseados em DMS está na economia de energia oferecida por estes quando comparada aos dispositivos tradicionais. Assim, o estudo e análise das propriedades eletrônicas, estruturais e magnéticas do semicondutor DMS Ga_{1-x}Mn_xN na fase wurtzita é necessária para uma melhor compreensão de seu comportamento e também a predição de possíveis aplicações futuras. O objetivo do presente trabalho foi a elaboração de um modelo computacional para a supercélula do Semicondutor Diluído Ga_{1-x}Mn_xN através de cálculos *ab initio*.

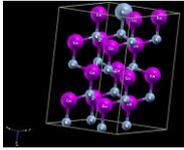
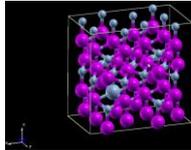
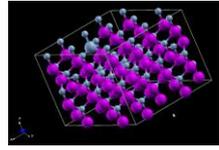
Resultados e Discussão

Foi utilizada a suíte de programas disponíveis no pacote computacional CRYSTAL06¹. O embasamento teórico do trabalho seguiu os paradigmas computacionais e metodológicos da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). O funcional híbrido B3LYP foi utilizado nos cálculos devido ao seu excelente desempenho no estudo de sistemas cristalinos. Os conjuntos de funções de base utilizados para descrever os átomos de Ga, N e Mn, foram: 864111/64111/41, 6-21G* e 86-4111G(41d), respectivamente. Foram construídos três modelos de supercélula para o *bulk*: com 32, 64 e 96 átomos. Para realizarmos os cálculos de menor energia, utilizamos o modelo de supercélula² descrito pela extensão da matriz *I*, definida pela relação:

$$A_j = \sum_{i=1}^3 l_{ji} a_i, \quad \det(I) = N,$$

Onde a_i são os vetores de translação da cela primitiva e A_j são os vetores de translação da supercélula e N é o número de unidades de cela primitiva na supercélula. Para minimizar a energia total da célula unitária em relação ao parâmetro de rede *a* e *c*, utilizou-se a cela primitiva do Nitreto de Gálio (GaN), obtendo-se *a*_{B3LYP} = 3,208 Å e *c*_{B3LYP} = 5,211 Å, sendo os mesmos utilizados para os cálculos do modelo de supercélula do Ga_{1-x}Mn_xN. A partir do novo parâmetro teórico, definimos os valores de Monkhorst-Pack para os pontos *k* da rede e a convergência para 2x2x2 *k*-points. Na tabela 1 apresentamos os modelos de supercélula obtidos para as diferentes concentrações de Mn.

Tabela 1. Modelo da supercélula do Ga_{1-x}Mn_xN

32 átomos (x=0,0625)	64 átomos (x=0,03125)	96 átomos (x=0,0208)
$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 0 \\ -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$
		

Conclusões

A otimização do parâmetro de rede para Ga_{1-x}Mn_xN é mais dispendioso em termos computacionais do que para o material GaN puro. O parâmetro de rede obtido pela lei de Végard está em boa concordância com outros resultados teóricos e experimentais relatados na literatura.

Agradecimentos

Ao POSMAT, FAPEMAT, CNPq e FAPESP.

¹ Dovesi, R.; Saunders, V. R.; Roetti, C.; Orlando, R.; Zicovich-Wilson, C. M.; Pascale, F.; Civalleri, B.; Doll, K.; Harrison, N. M.; Bush, I. J.; D'Arco, Ph; e Llunell, M. *Crystal 2006 User's Manual*, University of Turin, Turin, 2006.

² Gulans, A.; Evarestov, R. A.; Tale, I.; e Yang, C.C.. *Phys. Stat. Sol.* **2005**, *7*, 2525.