

# GaMnN 材料红外光谱中洛伦兹振子模型的遗传算法研究\*

程兴华<sup>1)</sup> 唐龙谷<sup>1)</sup> 陈志涛<sup>3)</sup> 龚 敏<sup>1)2)</sup> 于彤军<sup>3)</sup> 张国义<sup>3)</sup> 石瑞英<sup>1)2)†</sup>

1) 四川大学物理科学与技术学院微电子学系, 成都 610064)

2) 微电子技术四川省重点实验室, 成都 610064)

3) 北京大学宽禁带半导体研究中心, 北京大学物理学院, 北京 100871)

(2007 年 12 月 4 日收到, 2008 年 1 月 21 日收到修改稿)

利用红外反射光谱研究了蓝宝石衬底上用金属有机物化学气相淀积方法生长的稀磁半导体 GaMnN 材料的晶格振动特性. 并成功地将改进的遗传算法应用于其红外反射光谱洛伦兹振子模型参数的提取. 通过与 GaN 薄膜的洛伦兹振子模型参数的对比研究发现, GaN 掺入 Mn 后,  $\omega_{TO}$  向高频方向移动,  $\gamma$ ,  $\epsilon_\infty$  和  $\epsilon_s$  均增加, 而  $\omega_{LO}$  基本保持不变. 文中同时分析和讨论了 Mn 对晶格振动特性的影响及介电函数变化的机理.

关键词: 稀磁半导体 GaMnN 材料, 遗传算法, 洛伦兹振子模型, 参数提取

PACC: 7280E, 0765G, 0270

## 1. 引 言

稀磁半导体材料是近几年才制备成功的一种新型材料. 基于 III-V 族化合物的稀磁半导体(DMS)材料被认为是极具发展潜力的自旋电子器件材料, 因为它不仅支持载流子的自旋储存和输运, 而且以 III-V 族化合物稀磁半导体材料制成的自旋电子器件还可以与现有的微电子器件和光电子器件集成. 在稀磁半导体材料中, 掺 Mn 的 GaN(GaMnN)材料引起人们极大的注意, 因为 Zener 模型在理论上预测 GaMnN 的居里温度高于室温<sup>[1,2]</sup>. 目前有一些成功地制备了 GaMnN 薄膜的报道. 2004 年, Chitta 等人应用等离子体辅助分子束外延(PAMBE)方法生长出闪锌矿 GaN 薄膜, 随后离子注入 Mn, 辅以退火工艺制备了具有室温铁磁性的 p 型 GaMnN 薄膜<sup>[3]</sup>; 2006 年 Kane 等人研究了金属有机物化学气相淀积(MOCVD)方法生长的 GaMnN 薄膜的晶格动力学和结构特性<sup>[4]</sup>, Sonoda 等人报道了其用 MOCVD 方法制备的 GaMnN 薄膜居里温度可达 940 K<sup>[5]</sup>. 尽管如此, GaMnN 薄膜的电学和磁学性质仍存在争议, 并且针对其基础物理性质的实验研究并不多见. 而对

其物理特性的研究可以为将来的应用奠定良好的理论基础. 反映声子波特性的介电函数是设计各种发光器件和光学探测器件要考虑的基本参数, 基于稀磁半导体 GaMnN 材料的发光器件和光学探测器件的吸收系数是由 GaMnN 材料的介电函数所决定的. 所以, 研究 GaMnN 材料的晶格振动特性对基于稀磁半导体 GaMnN 材料的半导体光电器件的开发和研究有着极其重要的意义.

红外反射光谱是一种无损探针技术, 通过对极性半导体材料的红外反射光谱进行分析可以得到材料质量、晶格振动和缺陷等信息, 目前对红外光谱的分析和研究大多数集中在定性的观察特征峰的漂移上<sup>[6,7]</sup>, 而对于稀磁半导体 GaMnN 材料而言, 由于固溶度的限制, 材料中 Mn 组分的含量很低, 所以 GaN 中掺入 Mn 引起的特征峰的漂移量是微乎其微的, 因此很难观察到其特征峰的漂移. 另一方面通过定量的分析红外反射光谱, 从红外反射光谱中提取出稀磁半导体 GaMnN 材料晶格振动精确物理参数, 能更加精确地研究其物理性质, 但这方面的研究还未见报道. 要想从红外光谱中精确求解其物理参数, 就需要寻找一种合适的算法. 在已有的算法中, 遗传算法是一种全局优化算法, 在集成电路优化、微电

\* 国家自然科学基金(批准号: 60676052, 60676032)和国家重点基础研究项目特别基金(批准号: TG2007CB307004)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: ruiyshi@163.com

子器件等效电路模型参数提取等领域已有一些应用,但目前还没有人把它用于红外光谱研究,这是因为把遗传算法应用于不同的领域时有其自身的特殊性.本文借鉴文献[8]的成功经验,对遗传算法进行了改进,并将其成功的应用于 GaMnN 薄膜红外反射光谱的洛伦兹振子模型参数的提取.在  $739\text{--}539\text{ cm}^{-1}$  ( $1/\lambda$ ) 的波长范围内用改进型遗传算法精确地提取出 GaMnN 薄膜红外反射光谱的洛伦兹振子模型高频介电常数  $\epsilon_\infty$ , 静态介电常数  $\epsilon_s$ , 横光学波声子频率  $\omega_{\text{TO}}$ , 纵光学波声子频率  $\omega_{\text{LO}}$  和阻尼系数  $\gamma$  五个参数,在所提取参数波长范围内计算所得的红外反射光谱与测量的红外反射光谱符合得很好.最后,将提取出的 GaMnN 薄膜的洛伦兹振子模型参数与 GaN 的参数进行了对比,并对其结果进行了讨论,分析了 Mn 组分对 GaMnN 晶格振动特性的影响.

## 2. 稀磁半导体 GaMnN 材料红外反射光谱

实验所用样品为用 MOCVD 方法在蓝宝石衬底上生长的六方 GaMnN 外延薄膜.首先在蓝宝石衬底上用 MOCVD 方法生长一层非掺杂的 GaN 作为过渡层,然后再在 GaN 上用 MOCVD 方法生长一层 Mn 含量为 3% 的 GaMnN 薄膜.利用 PerKinElmer 公司的 Spectrum One(B) FTIR Spectrometer 测量了稀磁半导体 GaMnN 薄膜的红外反射光谱,测试光源为非偏振光,入射角度为  $45^\circ$ ,测试温度为室温,频率范围为  $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$  ( $2.5\text{--}25\text{ }\mu\text{m}$ ).测得的红外反射光谱如图 1 所示.

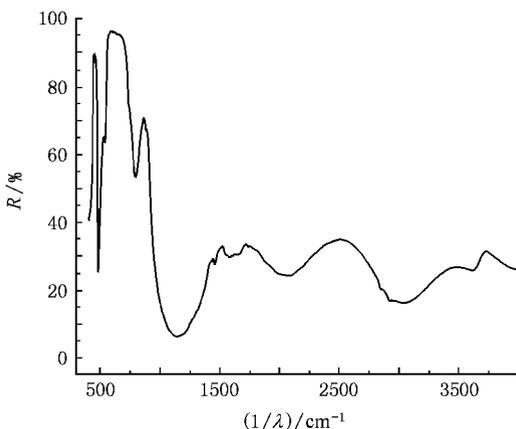


图 1 稀磁半导体 GaMnN 材料的红外反射光谱

从图 1 中没有观察到自由载流子吸收峰,说明自由载流子对红外反射光谱的影响可以忽略.  $1000\text{ cm}^{-1}$  以上的峰是由多层薄膜的干涉效应产生的,  $870\text{ cm}^{-1}$  和  $450\text{ cm}^{-1}$  附近的信号与蓝宝石的剩余射线带相关联<sup>[9]</sup>,  $750\text{ cm}^{-1}$  附近的峰是 GaMnN 外延层与蓝宝石衬底间的干涉信号<sup>[10]</sup>,  $539\text{--}739\text{ cm}^{-1}$  之间的峰才是反映稀磁半导体 GaMnN 材料晶格振动的信号,为 GaMnN 薄膜的剩余射线带.对它的研究可以得到 GaMnN 材料晶格振动模式的详细信息.

## 3. 红外反射光谱剩余射线带的模型描述

要想从红外光谱中得到材料晶格振动的详细信息,首先要建立红外反射光谱与反映材料晶格振动的物理参数之间的联系.洛伦兹振子模型描述了极性半导体材料晶格振动特性,通过洛伦兹振子模型可以得到红外反射光谱剩余射线带的频散关系.

对于极性半导体材料 GaMnN,其红外介电函数可以表示为经典的洛伦兹振子的介电频散关系<sup>[11]</sup>,即

$$\begin{aligned} \epsilon(\omega) &= \epsilon_r(\omega) - i\epsilon_i(\omega) \\ &= \epsilon_\infty \left( 1 + \frac{\omega_{\text{LO}}^2 - \omega_{\text{TO}}^2}{\omega_{\text{TO}}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $\epsilon_\infty$  为高频介电常数,  $\omega_{\text{LO}}$  为纵光学波声子频率,  $\omega_{\text{TO}}$  为横光学波声子频率,  $\gamma$  为阻尼系数,  $\omega$  为入射红外光的频率.静态介电常数  $\epsilon_s$  可表示为

$$\epsilon_s = \frac{\omega_{\text{LO}}^2}{\omega_{\text{TO}}^2} \epsilon_\infty. \quad (2)$$

洛伦兹振子模型的折射率  $n(\omega)$  和消光系数  $k(\omega)$  的频散关系为<sup>[11]</sup>

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}(\epsilon_r(\omega) + \sqrt{\epsilon_r(\omega)^2 + \epsilon_i(\omega)^2})}, \quad (3)$$

$$k(\omega) = \sqrt{\frac{1}{2}(-\epsilon_r(\omega) + \sqrt{\epsilon_r(\omega)^2 + \epsilon_i(\omega)^2})}. \quad (4)$$

反射率可表示为

$$R = 1 - \frac{4n}{(n+1)^2 + k^2}. \quad (5)$$

将洛伦兹振子模型的折射率  $n(\omega)$  和消光系数  $k(\omega)$  的频散关系带入反射率(5)式中即可得到表征洛伦兹振子的反射率的频率依赖关系,即红外反射光谱.

## 4. 提取洛伦兹振子模型参数

洛伦兹振子模型参数反映了极性半导体材料晶格振动特性, 精确地求出 GaMnN 的洛伦兹振子模型参数对研究 GaMnN 薄膜的声子模和介电函数有重要意义, 通过实验测得的红外反射光谱与利用洛伦兹振子模型计算得到的反射光谱拟合可求解洛伦兹振子模型参数, GaMnN 薄膜的洛伦兹振子模型参数的求解的特点是一个非线性拟和问题, 针对此类问题需要采用特殊的算法。

遗传算法是一种概率搜索算法, 模拟了自然选择和遗传中发生的复制、交叉和变异现象, 从任一初始种群出发, 通过选择、交叉和变异操作, 产生一代更适应环境的个体, 使种群进化到搜索空间中越来越好的区域, 这样一代代不断繁衍进化, 最终收敛到一群最适应环境的个体, 求得问题的最优解。

参数提取是通过改进型遗传算法使模拟计算与测量的反射率相拟合, 其拟合程度可用目标函数  $Obj_v$  表示, 即

$$Obj_v = \sum_{\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_0}}^{\frac{1}{\lambda_n}} \left( \frac{R_m - R_s}{R_m} \right)^2, \quad (6)$$

式中  $R_m$  为测量得到的反射率,  $R_s$  为模型模拟计算得到的反射率, 目标函数  $Obj_v$  越小, 提取的参数与实际的偏差也就越小。

根据理论分析和经验给出(1)式中的四个参数 ( $\epsilon_s$  可由这四个参数通过(2)式求得)的取值范围, 把这四个参数用一串 74 位二进制编码表示(这样提出的参数就可以精确到小数点后五位小数), 群体规模设为 40, 用适应度  $Fit_v = C - Obj_v$  ( $C$  为常数)来检验结果的好坏程度, 经过 40 代的选择、交叉和变异后停止算法, 并选出群体中适应度最好的个体作为算法的结果。在尝试用传统的遗传算法进行参数提取的过程中, 发现结果不能收敛, 多次提取的一致性不好等问题, 通过分析发现其原因在于在遗传算法执行的过程中, 选择、交叉和变异算子的选取直接影响到算法的速度和结果的收敛性, 而求解不同的问题时, 最佳的选择、交叉和变异概率不同, 需要多次实验来确定, 但找到这个最佳值需要花费很长的时间。因此我们对遗传算法进行了改进, 增加了一个过渡群体, 它包括由父代群体中复制得到的  $N$  个个体, 由单点交叉算子作用于父代群体中的每个串得

到的  $N$  个个体, 和对父代群体中的每个串执行变异操作得到的  $N$  个个体, 然后从这个过渡群体中的  $3N$  个个体中选择  $N$  个适应度好的个体组成子代群体, 这样就可以在算法执行的过程中自动优化选择、交叉和变异概率, 使子代群体有更强的适应性和更快的进化速度, 从而提高了提取参数的速度和计算的收敛程度。通过实验发现, 这种改进型遗传算法是一种简单、快速、有效的提取参数的方法。

## 5. 参数提取结果与讨论

用改进型遗传算法在  $539\text{--}739\text{ cm}^{-1}$  的频率范围内从红外反射光谱中提取了洛伦兹振子模型参数, 其目标函数值与遗传代数的关系如图 2 所示。从图 2 可以看出, 用改进型遗传算法提取参数最多只须经过四十代运算就可以得到满意的结果。为了验证算法所提取参数的准确度, 进行了多次提取参数的实验, 发现其一致性很好。提取的 GaMnN 和 GaN 的洛伦兹振子模型参数如表 1 所示。用表 1 的参数计算所得的反射光谱与测量所得的反射光谱的比较如图 3 和图 4 所示, 从图中可以发现参数计算所得的反射光谱与测量所得的反射光谱符合得很好。

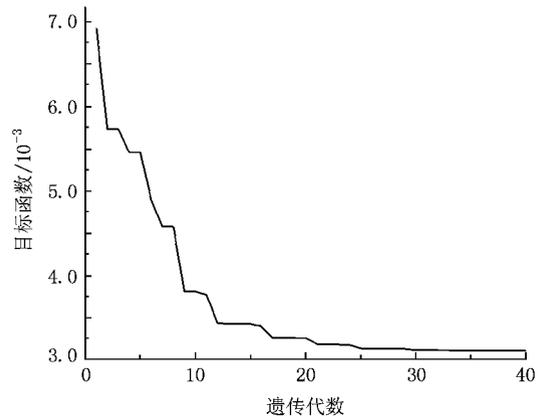


图 2 遗传算法寻优跟踪图

表 1 提取的 GaMnN 和 GaN 的洛伦兹振子模型参数与文献中 GaN 的洛伦兹振子模型参数的比较

| 参数                                    | GaMnN          | GaN            | GaN <sup>[2]</sup> |
|---------------------------------------|----------------|----------------|--------------------|
| 高频介电常数 $\epsilon_\infty$              | 5.44(±0.005)   | 5.09(±0.005)   | 5.0(±0.03)         |
| 纵光学波声子频率 $\omega_{LO}/\text{cm}^{-1}$ | 747.9(±0.03)   | 747.8(±0.03)   | 746.4(±1.7)        |
| 横光学波声子频率 $\omega_{TO}/\text{cm}^{-1}$ | 559.30(±0.003) | 558.44(±0.003) | 558.4(±0.6)        |
| 阻尼系数 $\gamma/\text{cm}^{-1}$          | 6.1(±0.03)     | 4.9(±0.03)     | 5.0(±0.2)          |
| 静态介电常数 $\epsilon_s$                   | 9.7(±0.5)      | 9.1(±0.5)      | 9.0(±0.24)         |

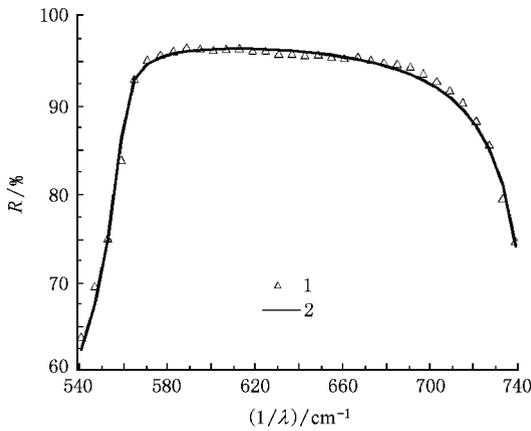


图3 计算与测量的稀磁半导体 GaMnN 材料的反射率(曲线 1 为参数计算;曲线 2 为测量反射光谱)

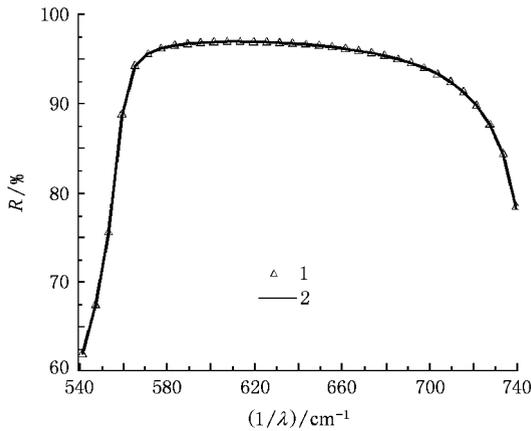


图4 计算与测量的 GaN 材料的反射率(曲线 1 为参数计算;曲线 2 为测量反射光谱)

表 1 的第一列和第二列分别为用遗传算法提取的 GaMnN 和 GaN 的洛伦兹振子模型参数,第三列为文献 [12] 报道的 GaN 的洛伦兹振子模型参数.对比表 1 的第二列和第三列可以发现,本文用遗传算法提取的 GaN 的洛伦兹振子模型参数与文献 [12] 报道的 GaN 的洛伦兹振子模型参数符合得较好.同时,通过对比表 1 中 GaMnN 与 GaN 的洛伦兹振子模型参数可以看出,GaN 掺入 Mn 后,横光学波声子频率  $\omega_{\text{TO}}$  会向高频方向移动,而纵光学波声子频率  $\omega_{\text{LO}}$  基本保持不变,同时阻尼系数  $\gamma$ ,高频介电常数  $\epsilon_{\infty}$  和静态介电常数  $\epsilon_s$  均增大. GaN 中掺入 Mn 后,材料的晶格常数减小<sup>[2]</sup>,材料中原子间的结合力和晶体的平移对称性减弱<sup>[2]</sup>,导致了横光学波声子频率  $\omega_{\text{TO}}$  向高频方向移动.阻尼系数  $\gamma$  的增加表明 GaN 中掺入 Mn 后晶体的质量会有显著的改变.计算的

GaMnN 与 GaN 剩余射线带介电函数的实部和虚部与波数的关系如图 5,图 6 所示.通过 GaMnN 与 GaN 剩余射线带的介电函数的对比发现,Mn 掺入 GaN 后使得剩余射线带区域的介电函数值有所降低,这是由于 Mn 的掺入使得晶格的本地振动减弱,所以在剩余射线带区域内显现出 GaMnN 的介电函数比 GaN 的略小.

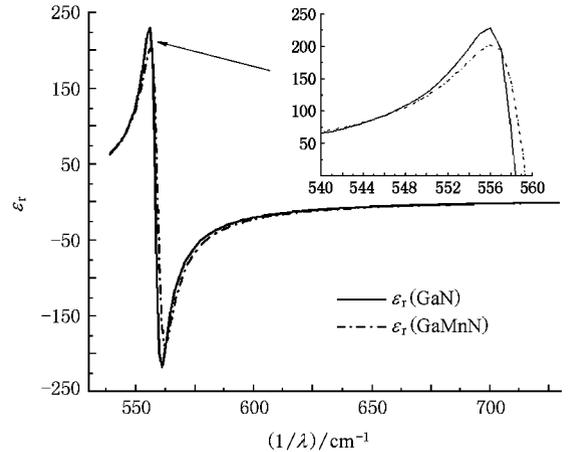


图5 GaMnN 与 GaN 剩余射线带介电函数的实部(右上角插入图为放大的 TO 模区域)

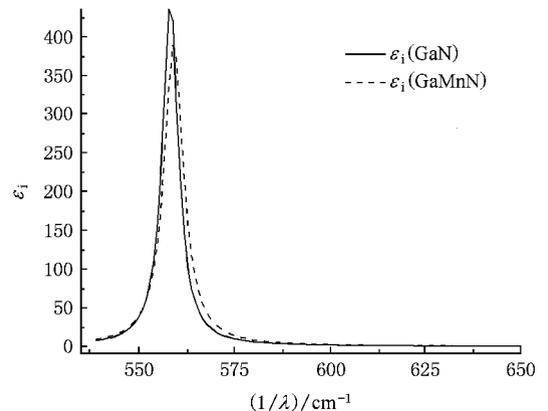


图6 GaMnN 与 GaN 剩余射线带介电函数的虚部

## 6. 结 论

本文运用红外反射光谱研究了稀磁半导体 GaMnN 材料的晶格振动特性,通过与 GaN 的比较,着重分析了 Mn 元素对 GaMnN 薄膜晶格振动特性和介电函数的影响.首次应用改进的遗传算法精确地从 GaMnN 外延薄膜的红外反射光谱中提取了

GaMnN 薄膜的洛伦兹振子模型参数,并将其应用于稀磁半导体 GaMnN 材料的红外光谱分析中,同时证实了改进型遗传算法是一种简单、快捷、有效的提取稀磁半导体材料洛伦兹振子模型参数的方法。通过把所提取的 GaMnN 洛伦兹振子模型参数与 GaN 的洛伦兹振子模型参数相对比发现, GaN 掺入 Mn 后,

$\omega_{TO}$  会向高频方向移动,而  $\omega_{LO}$  基本保持不变,同时  $\gamma$ ,  $\epsilon_{\infty}$  和  $\epsilon_s$  都增大。产生上述现象的原因是 Mn 的掺入使得晶体平移对称性和晶格的本地振动减弱。

感谢四川大学生物材料工程中心赵汇川老师在红外光谱测试中提供的帮助。

- [ 1 ] Popovic Z S, Satpathy S, Mitchel W C 2004 *Phys. Rev. B* **70** 161308
- [ 2 ] Thaler G, Frazier R, Gila B, Stapleton J, Davidson M, Abernathy C R, Pearton S J 2004 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2578
- [ 3 ] Chitta V A, Coaquira J A H, Fernandez J R L, Duarte C A, Leite J R 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 3777
- [ 4 ] Kane M, Gupta S, Fenwick W, Li N, Park E H, Strassburg M, Ferguson I 2006 *J. Cryst. Growth* **287** 591
- [ 5 ] Sonoda S, Shimizu S, Sasaki T, Yamamoto Y, Hori H 2002 *J. Cryst. Growth* **237** 1358
- [ 6 ] Bussetti G, Goletti C, Chiaradia P, Chiarotti G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 153316
- [ 7 ] Yang W B, Fan S H, Zhang G L, Ma P N, Zhang S Z, Du J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4945 (in Chinese) [ 杨武保、范松华、张谷令、马培宁、张守忠、杜健 2005 物理学报 **54** 4945 ]
- [ 8 ] Shi R Y, Liu X C, Qian Y X, Shi H F 2002 *Chinese Journal of semiconductors* **23** 957 (in Chinese) [ 石瑞英、刘训春、钱永学、石华芬 2002 半导体学报 **23** 957 ]
- [ 9 ] Schubert M, Tiwald T E, Herzinger C M 2000 *Phys. Rev. B* **61** 8187
- [ 10 ] Wetzel C, Haller E E, Amano H, Akasaki I 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 2547
- [ 11 ] Su W T, Li B, Liu D Q, Zhang F S 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2541 (in Chinese) [ 苏伟涛、李斌、刘定权、张凤山 2007 物理学报 **56** 2541 ]
- [ 12 ] Hu Z G, Strassburg M, Weerasekara A, Dietz N, Perera A G U 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 061914

# A genetic algorithm research on Lorentz oscillator model in infrared spectra of GaMnN<sup>\*</sup>

Cheng Xing-Hua<sup>1)</sup> Tang Long-Gu<sup>1)</sup> Chen Zhi-Tao<sup>3)</sup> Gong Min<sup>1,2)</sup> Yu Tong-Jun<sup>3)</sup> Zhang Guo-Yi<sup>3)</sup> Shi Rui-Ying<sup>1,2)†</sup>

<sup>1</sup> *Department of Microelectronics, Sichuan University, Chengdu 610064, China*

<sup>2</sup> *Key Laboratory of Microelectronics Technology of Sichuan Province, Chengdu 610064, China*

<sup>3</sup> *Research Center for Wide Gap Semiconductor of Peking University, Beijing 100871, China*

( Received 4 December 2007 ; revised manuscript received 21 January 2008 )

## Abstract

The lattice vibrations of diluted magnetic semiconductor GaMnN epitaxial films grown on sapphire substrates by metalorganic chemical vapor deposition have been investigated using infrared reflectance spectroscopy. The revised genetic algorithm was successfully used to extract the Lorentz oscillator model parameters of GaMnN from infrared reflectance spectra. Comparing the Lorentz oscillator model parameters of GaMnN with those of GaN, it was found that  $\omega_{TO}$  moved to higher frequencies,  $\gamma$ ,  $\epsilon_{\infty}$  and  $\epsilon_s$  increased, but the  $\omega_{LO}$  was almost not changed. The effects of Mn on the properties of lattice vibration and the mechanisms of variations of the dielectric function were also analyzed and discussed in this paper.

**Keywords** : diluted magnetic semiconductor GaMnN, genetic algorithm, Lorentz oscillator model, parameter extraction

**PACC** : 7280E, 0765G, 0270

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 60676052, 60676032 ) and National Key Basic Research Special Foundation of China ( 973 ) ( Grant No. TG2007CB307004 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : ruiyshi@163.com