

# **Infrared Ellipsometry on III-V semiconductor layer structures**

Der Fakultät für Physik und Geowissenschaften

der Universität Leipzig

eingereichte

Habilitationsschrift

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalis habilatus

Dr. rer. nat. habil.

vorgelegt

von Dr. rer. nat. Mathias Schubert

geboren am 19.10.1966 in Jena

Leipzig, den 08.05.2002

# Summary

This work presents the first comprehensive spectroscopic ellipsometry study of the infrared dielectric functions of multinary alloy, zincblende and wurtzite structure group-III-group-V semiconductor layers.

Contributions to the dielectric function due to infrared-active polar phonon modes and free-charge-carrier plasma modes are differentiated and quantified upon model line-shape analysis. The phonon mode parameters are sensitive to strain, composition, and the state of the atomic order within the multinary alloy layers. The free-charge-carrier parameters concentration, mobility, and effective (inert) mass can be derived from the dielectric function, either in combination with electrical Hall effect measurements or with magneto-optic generalized ellipsometry measurements.

The first complete measurement of the magneto-optic free-charge-carrier dielectric function tensor at infrared wavelengths by generalized ellipsometry is presented. The measured tensor component spectra provide simultaneous access to all three free-charge-carrier parameters of the Drude conductivity expression. Thereby, the effective mass can be obtained, and the infrared magneto-optic generalized ellipsometry technique is proposed as the first optical “inert” mass scale for free charge carriers in layered structures.

A comprehensive dielectric function database covering most of the novel wurtzite III-N alloys is developed. This database enables precise characterization of multiple layer device structures using infrared ellipsometry, which is demonstrated for layer structures designed for emission of coherent and incoherent light.

The generalized ellipsometry approach, developed and progressed for general anisotropic material situations, is successfully implemented for infrared applications. Fundamental issues of infrared light propagation in layered anisotropic materials are addressed and solved. Interface modes, such as Fano-, Brewster- or surface-guided waves, are assigned upon solution of the surface polariton dispersion relation for layered structures.

The importance of infrared ellipsometry is explained during the introductory part. Dielectric function models for lineshape analysis of the ellipsometry data are shown afterwards. The generalized ellipsometry approach is introduced together with the matrix algorithm used for the experimental data analysis. This algorithm contains solutions for arbitrarily anisotropic materials, including dielectric and dielectric helical symmetric and non-symmetric absorbing media. Solutions for helical situations are included as novelty. Bulk and interface polariton effects in semiconductor layer structures are shown and discussed. The last section comprises observation and discussion of multiple-component as well as magneto-optic free-charge-carrier effects in GaAs, free-charge-carrier depleted surface layers and effective mass determination in GaN, multiple-lattice-mode excitation in AlGaInP<sub>2</sub> alloys, atomic order-induced vibration modes in CuPt-type ordered GaInP<sub>2</sub>, and effects of strain and composition in novel nitrogen-diluted zincblende III-(As,P), and wurtzite III-N alloys. This section also contains the infrared ellipsometry analysis of multiple layered III-N device heterostructures.

New potential research areas, such as organic semiconductor materials, are addressed within the summary at the end of the volume.

# Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit berichtet über die erste umfassende spektralellipsometrische Untersuchung der Infrarot Dielektrischen Funktion von gemischten Gruppe-III-Gruppe-V Verbindungshalbleiterschichten mit Zinkblende oder Wurtzit Struktur.

Mit Hilfe von Linienform Modellen werden die Beiträge der Infrarot aktiven Gitterphononen sowie der freien Ladungsträger zur Dielektrischen Funktion differenziert und quantifiziert. Die Modellparameter der Gitterphononen sind empfindliche Funktionen der Verspannung, der chemischen Zusammensetzung, und des Grades der atomaren Ordnung in den gemischten Verbindungshalbleiterschichten. Die Parameter der freien Ladungsträger Konzentration, Beweglichkeit und effektive Masse können entweder im Zusammenhang mit elektrischen Hall-Effekt Messungen oder mittels magnetooptischer Verallgemeinerter Ellipsometrie unmittelbar aus der Dielektrischen Funktion bestimmt werden.

Die vorliegende Arbeit beschreibt die erste vollständige und spektrale Bestimmung des magnetooptischen Tensors der Dielektrischen Funktion für freie Ladungsträger im Infrarot Spektralbereich mittels Verallgemeinerter Ellipsometrie. Entsprechend der Theorie von Drude gestattet die Kenntnis der komplexen Tensorkomponenten die unabhängige Bestimmung des Parameters der effektiven Masse. Die magnetooptische Verallgemeinerte Ellipsometrie wird als erstmalige Realisierung einer optischen „Waage“ der trägen Massen freier Ladungsträger in Schichtstrukturen aufgefasst.

Für die neuen wurtzitäischen III-N Verbindungshalbleiter wurden die Dielektrischen Funktionen in einer Datenbank zusammengestellt. Dadurch gelingt die Modellanalyse komplexer Vielschichtsysteme, wie am Beispiel für Strukturen zur Emission von kohärentem und inkohärentem Licht gezeigt wird.

Die Methode der Verallgemeinerten Ellipsometrie, entwickelt für die Behandlung anisotroper Materialien, wird erfolgreich auf den Infrarot Spektralbereich übertragen. Grundlegende Fragestellungen der Ausbreitung von Licht in geschichteten anisotropen Medien werden behandelt und gelöst. Grenzflächenmoden (Fano, Brewster und Oberflächen Moden) werden anhand der Lösungen der Dispersionsgleichungen für Schichtstrukturen identifiziert.

Zu Beginn wird die Bedeutung der Ellipsometrie erläutert, und es werden Modelle der Dielektrischen Funktion aufgezeigt. Die Methode der Verallgemeinerten Ellipsometrie sowie der Matrixformalismus zur Datenanalyse werden eingeführt. Beschrieben werden Lösungen für beliebig anisotrope und absorbierende Materialien mit symmetrischen oder antisymmetrischen Dielektrischen Tensoren. Als Neuheit werden Lösungen für Medien mit Helix-artiger Struktur vorgestellt. Es werden Effekte der Ausbreitung von Polaritonen gezeigt und diskutiert. Das letzte Kapitel enthält die experimentelle Beobachtung und Erklärung von verschiedenen Plasmen freier Ladungsträger sowie der magnetooptischen Doppelbrechung in GaAs, an freien Ladungsträgern verarmten Randschichten in GaN, Gitterphononen in AlGaInP<sub>2</sub>, CuPt-Typ ordnungsinduzierte Schwingungsmoden in GaInP<sub>2</sub>, der Einfluss von Verspannung und Zusammensetzung in III-(As,P)-N, sowie in III-N Verbindungen. Das letzte Kapitel enthält die Analyse der komplexen III-N Vielschichtstrukturen.

Neue potenzielle Forschungsgebiete, wie die der organischen Halbleitermaterialien, werden am Ende der Arbeit aufgezeigt.

Contents:

1. Introduction .....	5
2. Infrared Model Dielectric Functions .....	9
2.1. Polar lattice resonance contributions.....	9
2.2. Free-carrier contributions.....	11
2.3. Low-polarity mode contributions.....	14
2.4. Anisotropic dielectric function tensor .....	15
2.5. Free-carrier magneto-optic contributions.....	16
3. Ellipsometry .....	18
3.1. Standard Ellipsometry.....	18
3.2. Generalized Ellipsometry .....	18
3.3. Light propagation in layered anisotropic media.....	19
3.4. Ellipsometry data analysis.....	21
3.5. Infrared Ellipsometry .....	22
4. Polaritons in semiconductor heterostructures .....	24
4.1. Bulk polaritons .....	24
4.1.1. Dispersion relation.....	24
4.1.2. Example: <i>i</i> -GaAs.....	25
4.2. Surface polaritons and surface guided waves .....	27
4.2.1. Dispersion relation.....	27
4.2.1.1. <i>SP</i> 's at the single interface (bound TM waves).....	28
4.2.1.2. Double interface <i>SP</i> 's (bound TM waves) .....	29
4.2.1.3. Double interface <i>SGW</i> 's (bound TE waves).....	29
4.2.2. Example: <i>i</i> -GaAs film on <i>n</i> -GaAs substrate .....	30
5. Phonons and plasmons in III-V alloys and heterostructures .....	37
5.1. (Al,Ga,In)-(As,P) .....	37
5.1.1. Multiple-component carrier plasma in <i>p</i> -type GaAs .....	37
5.1.2. Far-infrared Magneto-Optic Generalized Ellipsometry: An optical inert-mass scale for free charge carriers in semiconductors ( <i>n</i> -GaAs).....	39
5.1.3. Highly-disordered (Al <sub><i>x</i></sub> Ga <sub>1-<i>x</i></sub> ) <sub>0.52</sub> In <sub>0.48</sub> P/GaAs.....	44
5.1.4. Partially CuPt-ordered GaInP <sub>2</sub> /GaAs.....	48
5.2. Nitrogen in (In,Ga)-(As,P) .....	56
5.2.1. InGaNAs/GaAs.....	56
5.2.2. GaNP/GaP.....	60
5.3. Wurtzite (In,Al,Ga)-N/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> .....	62
5.3.1. GaN: Free-carrier properties.....	64
5.3.2. InAlN: Strain and alloying.....	66
5.3.3. GaN: Anisotropy.....	69
5.3.3.1. <i>a</i> -plane GaN on <i>r</i> -plane sapphire.....	69
5.3.3.2. Sculptured layers .....	70
5.3.4. Device heterostructures.....	73
5.3.4.1. Superlattice structure .....	74
5.3.4.2. Light-emitting diode structure .....	76
5.3.4.3. Laser diode structure .....	77
6. What is done, what is left? .....	81
References .....	83
A: General sources.....	83
B: Authored or co-authored references .....	87
Appendices .....	89
A1. 4×4 transfer matrix <b>T<sub>p</sub></b> for dielectric helical thin films (DHTF) .....	89
A2. TM waves at the interface between two half-infinite media.....	94
A3. TM waves at two stratified interfaces .....	96
A4. The origin of the Berreman effect.....	101
Acknowledgements .....	103