

다층 구조에 대한 새로운 strain 해석 모델

A new strain analysis model in epitaxial multilayer system

장동현, 심종인

한양대학교 전기전자제어계측공학과

jishim@giga.hanyang.ac.kr

Abstract

A new strain analysis model, so called the stress matched model, in an epitaxial multilayer system is proposed. The model makes it possible to know the strain, the stress, the elastic strain energy in each epitaxial layer. Analytical formulas of strain parameters in each epitaxial layer are derived under assumptions that the substrate thickness is finite and the in-plane lattice constant is the same for all epitaxial layers for dislocation free growth. As an example, the model is applied to a 405nm InGaN/InGaN multiple quantum well laser diode. Analysis result shows that Al_xGa_{1-x}N layer with Al mole fraction of 0.06 and the thickness of 6μm is one of good templates for a laser. In fact, this layer structure coincides with experimentally optimized one.

1. 서론

최근 질화물계 반도체는 청색, 자외선 영역의 발광다이오드와 레이저다이오드와 같은 발광소자에 널리 쓰이고 있다. 이들 발광소자는 일반적으로 (0001) 방향을 갖는 사파이어 또는 GaN 기판 위에 다층의 구조로 성장시킨다. 하지만 각 층의 격자 상수의 불일치로 인하여 각 층의 스트레스의 원인이 되며, 이는 발광소자의 광학적, 전기적 특성에 큰 영향을 미치게 된다.^(1,2) 이러한 다층 구조에서의 스트레인을 해석하는 기존의 방법에는 평균 격자상수 모델, 두께 가중 평균 모델, 제로 스트레스 모델이 있으나, 이들 모델은 물리적 직관에 의한 모델로 스트레인에 대한 정확한 해석은 하지 못하였다.⁽³⁾ 따라서 본 논문에서는 다층 구조를 갖는 질화물계 반도체의 정확한 스트레인 해석을 위해 stress matched model이라는 새로운 모델을 제안하였으며, 다층 구조를 갖는 405nm 레이저다이오드 구조에 적용하여 스트레인과 스트레스를 계산하였다.⁽⁴⁾

2. 본론

그림 1과 같은 다층 구조에서의 mechanical

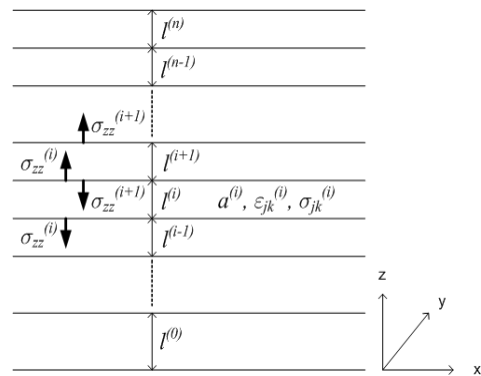


그림 1. n+1개의 층으로 이루어진 다층 구조와 좌표축

equilibrium 조건에 의해서 각 층과 인접한 두 층 사이의 stress는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\sigma_{xy}^{(i)} = \sigma_{xz}^{(i)} = \sigma_{yz}^{(i)} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (1)$$

$$\sigma_{zz}^{(i+1)} = \sigma_{zz}^{(i)}, \quad i = 0, 1, \dots, n-1. \quad (2)$$

이에 앞의 조건으로 각 층의 스트레인은 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\epsilon_{xy}^{(i)} = \epsilon_{yz}^{(i)} = \epsilon_{xz}^{(i)} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (3)$$

$$\epsilon_{xx}^{(i)} = \epsilon_{yy}^{(i)} = \frac{a - a^{(i)}}{a^{(i)}}, \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad (4)$$

표. 1 405nm InGaN/InGaN 다중양자우물 구조 레이저 다이오드

Layer number	Material composition	Thickness [nm]
0	Al _x Ga _{1-x} N	Variable
1	GaN	500
2	Al _{0.1} Ga _{0.9} N	800
3	GaN	100
4	In _{0.02} Ga _{0.98} N	110
5	In _{0.08} Ga _{0.92} N/In _{0.02} Ga _{0.98} N	4/10 (3-pair)
6	In _{0.02} Ga _{0.98} N	10
7	Al _{0.2} Ga _{0.8} N	20
8	Al _{0.1} Ga _{0.9} N	500
9	GaN	30

$$\epsilon_{zz}^{(i+1)} = \frac{2(C_{13}^{(i)} \epsilon_{xx}^{(i)} - C_{13}^{(i+1)} \epsilon_{xx}^{(i+1)})}{C_{33}^{(i+1)}} + \frac{C_{33}^{(i)}}{C_{33}^{(i+1)}} \epsilon_{zz}^{(i)},$$

$$i = 0, 1, \dots, n-1 \quad (5)$$

여기서 a 와 $a^{(i)}$ 는 각각 성장 후와 성장 전의 격자상수, $C_{ij}^{(i)}$ 는 i 층에서의 wurtzite 반도체의 elastic stiffness coefficient를 나타낸다. 위의 식 5는 결정 성장 방향으로 인접한 두 층 사이의 스트레인의 관계를 나타내고 있다. 또한 전체 스트레인 에너지가 최소가 되어야 하는 조건을 이용하여 성장 후의 성장면 격자상수 a 와 성장방향으로 각 층의 스트레인 $\epsilon_{zz}^{(i)}$ 를 얻을 수 있다.⁽⁴⁾ 따라서 식 4, 5에 의해 모든 층에 대한 스트레인을 구할 수 있으며, $\sigma_k^{(i)} = C_{km}^{(i)} \epsilon_m^{(i)}$ 에 의해 각 층의 스트레스를 모두 구할 수 있다.⁽⁵⁾

표 1은 405nm 레이저다이오드의 구조를 나타내고 있다. 위의 구조에서 Al_xGa_{1-x}N 층의 알루미늄의 조성비와 두께에 따라 다층 구조의 스트레인과 스트레스를 제안한 모델을 이용하여 계산하였다. 그림 2는 Al_xGa_{1-x}N(x=0.06)의 두께의 변화에 대한 성장면에서의 평균스트레스를 나타낸 그림이다. Al_xGa_{1-x}N층의 두께가 약 0.5 μ m와 6 μ m일 때, 평균스트레스가 최소가 됨을 알 수 있다. 그림 3은 Al_xGa_{1-x}N 층이 6 μ m일 때 Al 조성비 x 에 대한 평균스트레스를 보여주고 있다. $x=0.06$ 일 때 평균스트레스가 최소가 됨을 알 수 있다. Al_xGa_{1-x}N 층의 두께와 Al 조성비에 대한 스트레스를 비교하여 보면 다층 구조의 스트레스를 완화시키기 위해서는 Al 조성비를 조절하는 것이 더욱 중요하다는 것을 알 수 있다. 실제 Al_xGa_{1-x}N 층의 두께가 6 μ m, Al 조성비가 0.06(6%)인 이 구조는 실험적으로 얻은 405nm 레이저다이오드의 최적화된 구조와 일치함을 알 수 있었다.

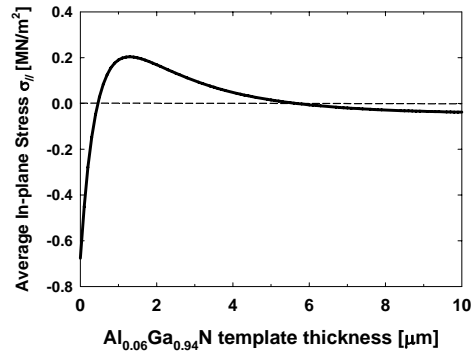


그림 2. Al_{0.06}Ga_{0.94}N 층의 두께에 따른 성장면에서의 평균스트레스

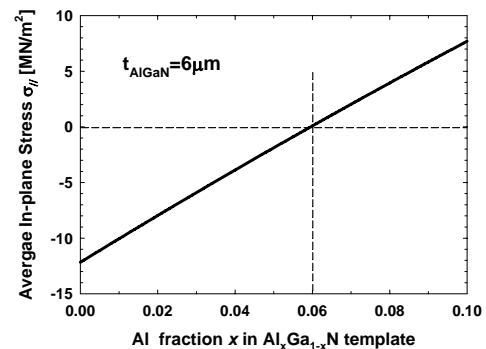


그림 3. 6 μ m 두께를 갖는 Al_xGa_{1-x}N 층의 Al의 조성비에 대한 성장면에서의 평균스트레스

3. 결 론

본 논문에서는 다층구조에서의 기존의 스트레인 해석 모델에 비해 정확한 해석이 가능한 새로운 모델인 stress matched model을 제안하였다. 새롭게 제안된 모델을 실제 레이저다이오드의 다층 구조에 적용한 시뮬레이션 결과와 실험적으로 얻은 최적화된 구조와 매우 잘 일치함을 알 수 있었다.

참고문헌

1. E. Fred Schubert, Light Emitting Diodes (Cambridge, NewYork, 2003)
2. S. Nakamura, G. Fasol, and S. J. Pearton, *The Blue Laser Diode*(Springer NewYork, 2000)
3. N. J. Ekins-Daukes, *et al.*, *Crystal Growth and Design* Vol. **2**, 287 (2002)
4. J. I. Shim, J. Appl. Phys. (not published yet) (2007)
5. J. F. NYE, *Physical properties of crystals*, (Oxford University Press, NewYork, 1985)