

GaAs/AlGaAs 3-Quantum Well 양자폭포레이저 (Quantum Cascade Lasers)에서 허용되는 에피정밀도를 위한 활성영역 모의실험

이혜진^{1,2} · Cheng Ming Lee¹ · 한일기^{1*} · 이정일¹ · 김문덕²

¹한국과학기술연구원 나노소자연구센터, 서울 136-791

²충남대학교 물리학과, 대전 305-764

(2007년 7월 1일 받음)

양자폭포레이저에서 활성영역의 모의실험을 위하여 Runge-Kutta 방법과 shooting 방법을 이용하여 슈뢰딩거 방정식의 해를 구하였다. 활성영역의 두께 변화에 대하여 발진파장, 포논공명 에너지, 분극행렬요소 (dipole matrix element) 등의 특성변화를 관찰하였고, 이로부터 양자폭포레이저를 위한 에피성장에서 허용될 수 있는 최소한의 두께 정밀도를 제안하였다.

주제어 : 양자폭포레이저, 부밴드 전이, 양자우물, 분극행렬요소

I. 서 론

양자폭포레이저 (Quantum cascade lasers)는 전도대 (conduction band)에 존재하는 부밴드간 전이 (intersubband transition)을 이용하는 발광소자이다. 따라서 두께의 조절만으로 중적외선은 물론 원적외선, 더 나아가 THz 영역까지 발광 파장을 가질 수 있는 장점을 가진 광원이라 할 수 있다.

양자폭포레이저 개념은 1971년에 Kazarinov와 Suris에 의하여 처음 제안된 이후 23년이 지난 1994년에 Capasso와 Faist 등에 의하여 처음으로 개발되었다 [1,2]. 이를 효시로 활발한 연구가 진행되어, 2002년에 최초로 상온연속 발진에 성공하였고, 2004년에는 상온 연속발진으로 광출력이 640 mW인 양자폭포레이저가 개발되는 수준에 이르렀다 [3,4].

이와 같이 양자폭포레이저에 대한 연구결과가 상당한 수준에 도달하고 관련하여 많은 연구논문들이 보고되었음에도 불구하고 대부분의 연구 결과는 소수 몇몇 그룹에서만 발표되고 있는 상황이다. 이는 양자폭포레이저가 고도의 밴드갭 엔지니어링 기술과 에피층의 두께를 원자단위로 조절할 수 있는 초정밀 에피성장 기술 등 고난이도의 기술을 요구하기 때문이다. 그러나 지금까지 에피성장의 정밀성이 요구된다는 보고만 있었지 어느 정도로 정밀해야 하는지에 대한 구체적인 연구는 거의 보고되지 않았다. 본 논문에서

서는 양자폭포레이저에서 에피층의 두께 변화에 대하여 파장 및 분극행렬요소 (dipole matrix element)의 변화 특성을 모의실험 하였고, 이로부터 양자폭포레이저에서 에피성장시 허용될 수 있는 최소한의 두께 정밀성을 제안하였다.

II. 수식 전개

이종접합 전도대에서 전자의 고유에너지를 계산하기 위한 슈뢰딩거 방정식은 다음과 같이 표현된다.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(E, z)} \frac{d}{dz} \right] + V(z) \right) \Phi(z) = E\Phi(z) \quad (1)$$

여기서 z 는 에피 성장 방향을 나타낸다. $\Phi(z)$ 는 전도대의 싸개 함수 (conduction band envelope function)를, $m^*(E, z)$ 는 전자의 유효 질량을, 그리고 $V(z)$ 는 이종 접합 전도대의 포텐셜을 나타낸다.

Runge-Kutta 방법을 사용하면 슈뢰딩거 방정식은 두 개의 1 차 미분 방정식으로 분리되며 다음과 같이 표시된다 [5].

$$\begin{cases} \frac{d}{dz}(\Phi(z)) = -\frac{2}{\hbar} (E - V(z))\Psi = f(z, \Psi) \\ \frac{d}{dz}(\Psi(z)) = m^*(E, z) \cdot \Phi = g(z, \Phi) \end{cases} \quad (2)$$

* [전자우편] hikoel@kist.re.kr

z 가 $z+dz$ 로 변할 때, 위의 일차 미분방정식은 다음과 같은 형태로 전개할 수 있다 [6].

$$\begin{cases} \Psi(z+dz) = \Psi(z) + \frac{\delta z}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ \Phi(z+dz) = \Phi(z) + \frac{\delta z}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \end{cases} \quad (3)$$

이때 k_i ($i = 1, 2, 3, 4$)와 l_j ($j = 1, 2, 3, 4$)는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} k_1 &= g(z, \Phi(z)) \\ k_2 &= g\left(z + \frac{\delta z}{2}, \Phi(z) + \frac{\delta z}{2}l_1\right) \\ k_3 &= g\left(z + \frac{\delta z}{2}, \Phi(z) + \frac{\delta z}{2}l_2\right) \\ k_4 &= g(z + \delta z, \Phi(z) + \delta zl_3) \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} l_1 &= f(z, \Psi(z)) \\ l_2 &= f\left(z + \frac{\delta z}{2}, \Psi(z) + \frac{\delta z}{2}k_1\right) \\ l_3 &= f\left(z + \frac{\delta z}{2}, \Psi(z) + \frac{\delta z}{2}k_2\right) \\ l_4 &= f\left(z + \delta z, \Psi(z) + \frac{\delta z}{2}k_3\right) \end{aligned} \quad (5)$$

위와 같은 식을 사용하여 양자폭포레이저 활성영역 내에서의 부밴드 에너지 준위를 구하였다. 이때 Ψ 와 Φ 는 각각의 경계면에서 연속이고 $z=0$ 에서 $\Psi(0)=0$ 과 $\Phi(0)=constant$ 인 무한 우물의 경계조건을 이용하였고, $z=L$ 에서 $\Psi(L)=0$ 이 되게 하는 에너지를 찾아내는 shooting 방법을 이용하였다 (여기에서 L 은 활성영역의 오른쪽 끝까지의 거리). 이렇게 구하여진 에너지 준위는 다시 슈뢰딩거 방정식에 대입하였으며, 이를 통하여 파동함수를 구하였다. 양자폭포레이저 활성영역 구조는 4개의 장벽층과 3개의 우물로 구성된 3-양자우물 (3-quantum wells) 구조로 하였다. 이와 같은 3-양자우물 구조는 최초로 개발된 양자폭포레이저에 적용된 구조로서, 부밴드 전이가 동일한 양자우물 내에서 일어나지 않고, 인접한 다른 양자우물에 존재하는 부밴드 사이에서 일어나는 구조이다 [2]. 계산을 위한 변수로서 3-양자우물 구조를 이루는 4개의 장벽층과 3개의 우물층의 두께가 고려되었고, 외부 전기장의 크기를 조절할 수 있도록 하였다. 또한 에너지 밴드에 의존하는 전자의 유효질량을 고려하였다 [7].

III. 모의실험 결과 및 논의

양자폭포레이저에서 활성영역의 모의실험을 위하여 본 연구에서 개발된 프로그램의 신뢰성을 조사하고자 하였다. 이를 위하여 참고문헌 [8]에 발표된 GaAs/AlGaAs 양자폭포레이저의 활성영역을 비교를 위한 기준으로 하였다 (이후부터 이 구조를 표준 활성영역으로 명명하기로 함). 참고문헌 [8]에 발표된 구조를 비교를 위한 표준 활성영역으로 사용한 것은 중적외선 파장을 위한 GaAs/AlGaAs 기반 3-양자우물 구조에서 가장 대표적인 구조이기 때문이다. 표준 활성영역은 3개의 GaAs 양자우물과 4개의 $Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ 장벽으로 구성되어 있다. 각 우물 및 장벽의 두께는 **5.8/1.5/2.0/4.9/1.7/4.0/3.4** nm (bold체는 $Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ 장벽층을 의미)이며, 이 3-양자우물 구조에 인가된 전기장은 48 kV/cm 이다 [8]. 각 우물 및 장벽의 두께는 활성영역 내에 존재하는 부밴드의 에너지 준위를 조절하기 위해 결정된 값이다. 한편 양자폭포레이저의 활성영역에 인가되는 전기장의 값은 구조마다 차이가 있으며, 본 표준 활성영역에서 48 kV/cm 값이 사용된 것은 이 값에서 활성영역 내의 부밴드와 활성영역 외부에서 활성영역으로 전류를 공급하여 주는 주입영역 내 부밴드가 동일 에너지 준위에 존재하게 되며 동시에, 활성영역 내 부밴드 사이의 전이에너지가 원하는 값 (발진파장 및 포논 공명에너지)으로 되기 때문이다.

표준 활성영역을 구성하고 있는 3개의 우물과 4개의 장벽층의 두께를 본 연구에서 개발된 프로그램에 대입하여

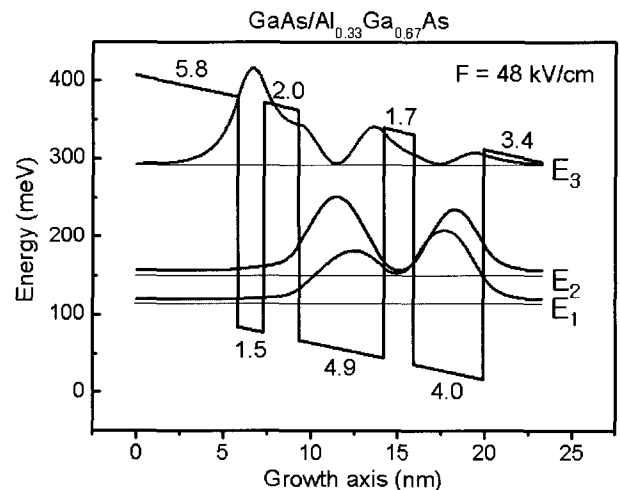


그림 1. 참고문헌 [8]에 나타난 활성영역의 두께를 본 연구에서 개발한 프로그램에 대입하여 계산한 활성영역

계산된 결과를 그림 1에 나타내었다. 각 부밴드 에너지 준위에서의 파동함수는 내부 장벽층에서의 투과로 인하여 활성영역 전 범위에 걸쳐 분포하고 있음을 보여주고 있다. 계산된 에너지 값은 $E_{32} (\equiv E_3 - E_2) = 136 \text{ meV}$ 이고 이것은 표준 활성영역에서 나타낸 값 134 meV 에 비하여 약 $+2.985\%$ ($+2 \text{ meV}$) 차이가 나고, $E_{21} (\equiv E_2 - E_1) = 36.8 \text{ meV}$ 로 표준 활성영역에서 나타낸 값 38 meV 에 비하여 약 -3.158% (-1.2 meV) 차이가 나는 것으로 확인되었다. 이와 같은 차이는 계산에서 실제로 사용된 상수 (예를 들어 유효질량 등)가 참고문헌에서 사용된 상수와 정확히 일치하지 않기 때문이며, 따라서 본 연구에서 개발된 프로그램이 수 % 내에서 신뢰할 수 있음을 보여주는 한 예가 된다. 여기에서 E_{32} 와 E_{21} 는 양자폭포레이저에서 발진 파장의 크기와 포논공명 에너지를 나타낸다.

양자폭포레이저에서 사용되는 양자우물 및 장벽의 두께는 수 nm 정도이므로 실제 구현하기에 굉장히 까다롭기 때문에 초정밀의 에피성장 기술이 필요하며, 따라서 에피성장 과정에서 약간의 두께오차가 발생할 경우 양자 폭포 레이저의 발진에 어떠한 영향을 주는지에 대한 고려가 필요하다.

참고문헌 [8]에 나타낸 표준 활성영역의 두께 (23.30 nm)를 기준으로 90% (21.51 nm), 95% (22.14 nm), 100% (23.3 nm), 105% (24.47 nm), 110% (25.63 nm)로 조

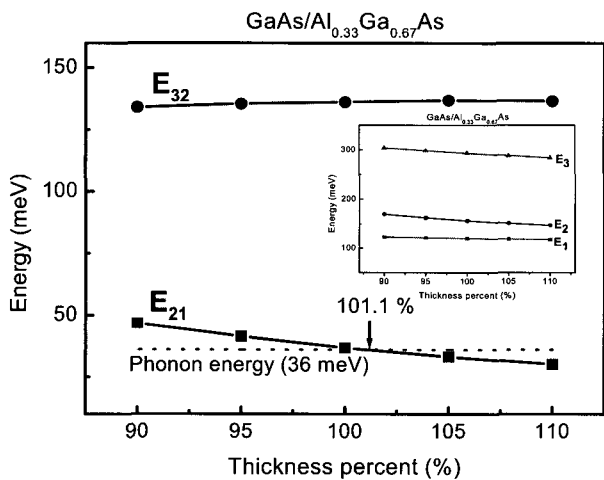


그림 2. 활성영역의 두께에 따른 E_{32} 및 E_{21} 의 변화. 여기에서 점선은 GaAs에서 포논 공명에너지 (약 36 meV)를 나타내고, 화살표로 나타낸 101.1%는 광포논 공명이 일어날 수 있는 활성영역 두께의 최대 허용치를 나타낸다. 두께 100%는 표준 활성영역의 두께임. 내부 그림은 두께 %에 대하여 활성영역 내에 존재하는 부밴드의 에너지 준위 변화를 나타냄

정된 두께를 이용하여 본 연구에서 개발된 프로그램으로 E_{21} 과 E_{32} 의 변화를 모의실험 하였고, 그 결과를 그림 2에 나타내었다. 두께가 증가함에 따라 E_{32} 의 경우 변화가 크지 않음을 알 수 있고, 이는 당초 희망하였던 두께보다 약 $\pm 10\%$ 의 두께 차이로 성장되어도 파장의 변화는 그리 크지 않음을 설명한다. 이와 대조적으로 E_{21} 의 경우 두께가 증가함에 따라 점진적으로 감소함을 알 수 있다. 일반적으로 E_{21} 의 경우 포논 공명에너지보다 작을 경우 밀도반전에 문제가 되므로 양자폭포레이저가 레이저로서 동작을 하기 위해서는 E_{21} 이 포논 공명에너지보다 커야만 한다. GaAs 물 질계의 경우 포논 공명에너지는 약 36 meV인데 이 값에 해당하는 두께는 그림 2에 보이는 것처럼 두께 %가 약 101.1% 지점인 것을 알 수 있다. 이는 참고문헌 [8]에 나타낸 양자폭포레이저 구조의 경우 에피성장시 활성영역의 두께 오차는 최대 101.1%까지만 허용될 수 있음을 의미하며, 그 보다 두껍게 성장될 경우 양자폭포레이저로 동작하는데 적합하지 않음을 설명한다. 그림 2의 내부그림은 활성영역의 두께 비율이 증가함에 따라 에너지 준위 1, 2, 3의 변화를 나타낸 것이다. 에너지 준위 3과 2의 경우 줄어드는 비율이 거의 비슷한 반면, 에너지 준위 1의 줄어드는 비율은 상대적으로 큰 변동이 없음을 볼 수 있다. 이와 같은 특성은 두께에 따라 E_{32} 의 변화가 상대적으로 작고, E_{21} 이 감소하는 원인을 잘 설명한다.

그림 3은 활성영역의 두께 변화에 따라 분극행렬요소 z_{ij} 를 계산한 것이다. 이 때 z_{ij} 는 아래의 식 (6)에 의하여 구하였다 [9].

$$z_{ij} = \frac{\hbar}{2(E_i - E_j)} \langle \Phi_i | p_z \frac{1}{m^*(E_i, z)} + \frac{1}{m^*(E_j, z)} p_z | \Phi_j \rangle \quad (6)$$

여기에서 Φ_i 와 Φ_j 는 각각 i 와 j 준위에서의 파동함수이며, i 와 j 준위에서의 에너지 값을 구한 후 슈뢰딩거 방정식에 그 값을 다시 삽입함으로써 구하였다. $p_z (= -i\hbar(\partial/\partial z))$ 은 z 방향, 즉 에피성장 방향으로의 운동량 작용자 (operator)이다. 두께 %가 증가하면서 z_{21} 값의 변화는 크지 않은 반면 z_{32} 는 급격하게 증가하는 것을 알 수 있다. z_{32} 가 z_{21} 보다 크다는 것은 에너지 준위 3에서 2로의 전이가 우세함을 의미한다. 양자폭포레이저를 위한 z_{32} 값이 얼마인지는 정확히 알려진 바 없지만 부밴드 전이를 위한 z_{32} 값이 보통 1~2 nm 사이에 있다는 것을 고려할 때 [9-11] 에피성장시

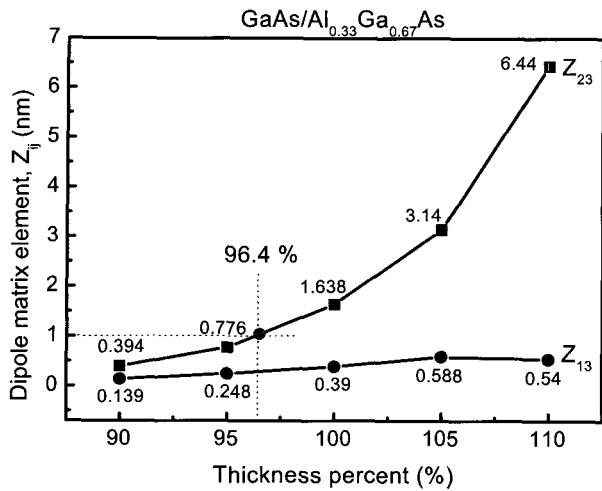


그림 3. 활성영역의 두께에 따른 분극행렬요소의 크기 변화

허용될 수 있는 최소 두께는 약 96.4 % 인 것으로 추론할 수 있다. 물론 그림 2와 3을 통하여 보여준 최대 및 최소 허용두께는 양자폭포레이저가 동작할 수 있는 최소 조건이며, 또 다른 조건에 의하여 더 엄격히 제한 될 수 있을 것으로 판단된다.

전자의 유효질량이 에너지에 의존하는 비포물선 (nonparabolicity) 특성은 양자폭포레이저 계산에서 일반적으로 사용 된다 [8, 9, 12]. 본 연구에서는 비포물선과 포물선 사이의 차이가 에피성장시 발생할 수 있는 두께 오차의 범위 내에 있는지의 여부와 그에 따른 중요성 정도를 판단하고자 한다.

그림 4는 참고문헌 [8]에 있는 표준활성 영역을 비포물선 요소를 고려하지 않았을 때 모의실험 한 에너지 밴드를 나타낸 것이다. 이때의 에너지 준위 간 차이는 각각 $E_{21}=38.32$ meV, $E_{32}=146.64$ meV로 그림 1에 나타낸 비포물선을 고려했을 때의 값과 비교하였을 때 E_{21} 은 +4.1 % (+1.52 meV), E_{32} 는 +7.8 % (+10.64 meV)의 차이를 보여 주고 있다. 그림 4에서 $E_{21}=38.32$ meV인 값은 그림 2에서 두께가 98.65% (즉 기준보다 -1.35%)인 경우에 해당하며 이는 앞에 설명한 바와 같이 부밴드 전이가 일어날 수 있는 최소 허용두께 범위 내에 있음을 알 수 있다. 그러나 E_{32} 의 경우 그림 2에서 볼 수 있는 것처럼 두께의 광범위한 변화에도 불구하고 대응하는 값을 찾을 수 없음을 알 수 있다. 이와 같은 결과는 포물선 요소를 고려할 경우 양자폭포레이저의 발진파장이 에피 성장에 의한 두께 오차율의 범위를 벗어날 수 있다는 것을 의미한다. 이와 같은 결과로 미루어, 실제 양자폭포레이저의 발진파장을 보다 정확히 계산

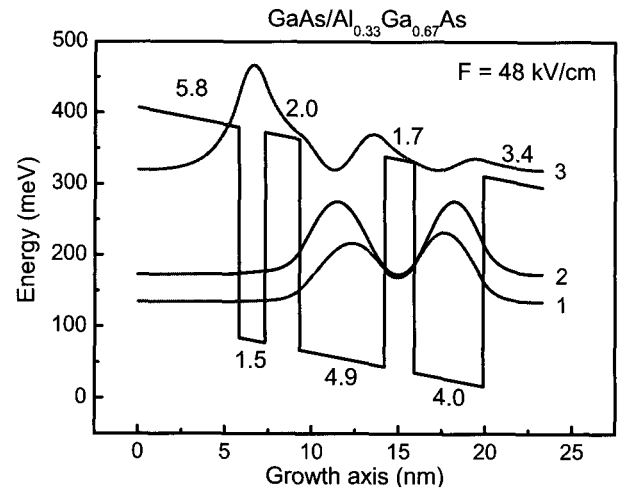


그림 4. 전자의 유효질량에서 비포물선 요소를 고려하지 않았을 때의 에너지 밴드 계산 결과. 참고문헌 [8]에 나타난 표준 활성영역의 에피층 두께를 모의실험에 적용하였음.

하기 위해서는 비포물선 요소를 고려해야 한다는 것을 알 수 있다.

IV. 결 론

3-양자우물로 구성된 양자폭포레이저의 활성영역에서의 에너지 준위와 파동함수를 구하기 위하여 Runge-Kutta 방법과 Shooting 방법을 사용하여 슈뢰딩거 방정식의 해구하기 프로그램을 개발하였다. 표준 양자우물 구조를 사용하여 에너지 준위를 구한 결과 $\pm 3\%$ 내외에서 신뢰할 수 있음을 확인할 수 있었다. 개발된 프로그램을 이용하여 표준 양자우물 구조보다 두께가 얇거나 더 두꺼운 양자우물 구조에 대하여 부밴드 에너지 차이 (E_{32} , E_{21})와 분극행렬요소의 크기를 구하였고, 이로부터 양자폭포레이저로 동작하기 위해서 허용되는 에피성장에서의 최소 오차와 최대 오차 범위를 제시하였다.

감사의 글

이 논문은 산업자원부 민군겸용기술사업 (Quantum Cascade Laser 가스센서 개발)과 2007년도 과학기술부의 재원으로 국제과학기술협력재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (No. M60605000007).

참고문헌

- [1] R. Kazarinov and R. A. Suris, *Sov. Phys. Semicon.* **5**, 707 (1971).
- [2] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho, *Science*, **264**, 553 (1994).
- [3] M. Beck, D. Hofstetter, T. Aellen, J. Faist, U. Oesterle, M. Ilegems, E. Gini, and H. Melchior, *Science*, **295**, 301 (2002).
- [4] A. Evans, J. S. Yu, J. David, L. Doris, K. Mi, S. Slivken, and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 314 (2004).
- [5] A. F. J. Levi, *Applied Quantum Mechanics* (Cambridge University, Cambridge, 2003), pp. 440-441.
- [6] S. B. Slivken, *Quantum cascade lasers grown by gas-source molecular beam epitaxy* (Evanston, Illinois, 2002).
- [7] H. C. Liu, *Intersubband Transitions in Quantum Wells* (Academic, San Diego, 2000), p. 6.
- [8] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, P. Collot, J. Nagle, M. Beck, J. Faist, and U. Oesterle, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 3486 (1998).
- [9] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist, and S. Scandolo, *Phys. Rev.* **B 50**, 8663 (1994).
- [10] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco, J. N. Baillargeon, A. L. Hutchinson, S. N. G. Chu, and A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 3680 (1996).
- [11] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, F. H. Julien, and L. R. Ram-Mohan, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 711 (1998).
- [12] 김영주, 손기수, *한국진공학회지* **1**, 60 (1992).

Active Layer Simulation for the Tolerance of Epi-layer Thickness at GaAs/AlGaAs 3-Quantum Well Quantum Cascade Lasers

Hye Jin Lee^{1,2}, Cheng Ming Lee¹, Il Ki Han^{1*}, Jung Il Lee¹ and Moon Deock Kim²

¹*Nano Device Research Center, Korea Institute of Science and Technology, Seoul 136-791*

²*Department of Physics, Chungnam National University, Daejeon 305-764*

(Received July 1, 2007)

For the simulation of active region in the quantum cascade lasers (QCL), we solved Schrodinger equation utilizing Runge-Kutta method and Shottig method. Wavelength, phonon resonant energy, and dipole matrix element were simulated with the variation of active region thickness. As a result of such simulation, it was suggested the tolerance range of epi-layer thickness error when 3-quantum well QCL structures are grown.

Keywords : Quantum Cascade Lasers, Intersubband Transition, Quantum Well, Dipole Matrix Element

* [E-mail] hikoel@kist.re.kr