

Simulation zur Optimierung von Quantenkaskadenlasern

Stefan Birner, nextnano³, München
 Tillmann Kubis, Peter Vogl, Walter Schottky Institut,
 Technische Universität München, Garching

Quantenkaskadenlaser stehen noch am Anfang ihrer wirtschaftlichen Karriere. Die Wellenlänge, mit der diese Laser emittieren, hängt von dem Schichtsystem ab, aus dem sie aufgebaut sind. Durch die Simulation der Vorgänge im QCL lassen sich Wellenlänge und Leistungsmerkmale anwendungsspezifisch optimieren.

Die Emissionswellenlänge von Quantenkaskadenlasern (englisch: quantum cascade laser, QCL) ist unabhängig von der Bandlücke der verwendeten Halbleitermaterialien. Dies eröffnet den Zugang zu Wellenlängen im mittleren (3-30 μm) und fernen Infrarot (30-500 μm), wobei der letztgenannte Spektralbereich auch als Terahertz-Bereich (0,6-10 THz) bezeichnet wird. 1971 wurden QCL theoretisch vorhergesagt [1] und 1994 in den Bell Laboratories (USA) erstmals realisiert [2].

QCL werden üblicherweise mit epitaktischen Verfahren hergestellt (z.B. Molekularstrahl-epitaxie). Dabei werden auf einer dünnen Scheibe eines Halbleiterkristalls nur wenige Atomlagen dicke Schichten (1-15 nm) aus verschiedenen Halbleitermaterialien aufgebracht (**Bild 1**), z.B. InAlAs/InGaAs-

Schichten auf InP-Wafern. Mit der Wahl einer geeigneten Abfolge von unterschiedlich dicken Halbleiterschichten werden die Elektron-Wellenfunktionen hinsichtlich ihrer Energie und Aufenthaltswahrscheinlichkeit optimiert (wavefunction engineering), damit der Laser bei der gewünschten Wellenlänge mit einer möglichst hohen Leistung emittiert. Bei Raumtemperatur liegen typische Leistungen bei 50-300 mW im Dauerstrichbetrieb, im gepulsten Betrieb in etwa doppelt so hoch.

Marktüberblick

Der Markt für Quantenkaskadenlaser ist derzeit ein Nischenmarkt. Erhältlich sind QCL seit einigen Jahren von kleineren Start-ups wie Alpes Lasers (Neuchâtel)

oder nanoplus (Würzburg), zunehmend werden aber auch größere Unternehmen wie Alcatel-Thales (Frankreich) und Hamamatsu (Japan) in diesem Bereich aktiv. Alpes Lasers, ein Spin-off der Universität Neuchâtel, ist dabei der Marktführer mit einem Anteil von ca. 80% und zählt mit Prof. Jérôme Faist einen der Erfinder dieser Lasertechnik zu ihren Gründern. Je nach Wellenlänge und Leistungsmerkmalen reichen die Stückpreise für QCL von ca. 5000 bis 20 000 €. Im Vergleich: Andere Halbleiterlasertypen sind zu Stückpreisen von etwa 0,40 € erhältlich, wie z.B. VCSEL (Vertical Cavity Surface Emitting Laser), die in Computermäusen Verwendung finden.

Derzeit wird der Absatz für QCL auf maximal 1000 Stück pro Jahr geschätzt. Bis zum Jahr 2010 werden Stückzahlen von 100 000 erwartet, bei Preisen von ca. 200-300 €/Stück für Standardlaser. Diese Marktchancen erkannten weitere Start-ups wie Maxion Technologies (Maryland/USA, Ausgründung des US Army Research Laboratory), Q-on (Wien, Ausgründung der TU Wien) oder Argos Tech (Santa Clara/USA), das die ehemaligen QCL-Aktivitäten von Agilent Technologies fortführt. Mittlerweile sind Messgeräte erhältlich, die auf QCL basieren, z.B. von neoplas control aus Greifswald, Cascade Technologies (Schottland) oder Daylight Solutions (USA). Anwendungen sind momentan hauptsächlich in der Gas-sensorik zu finden (Wellenlängenbereich

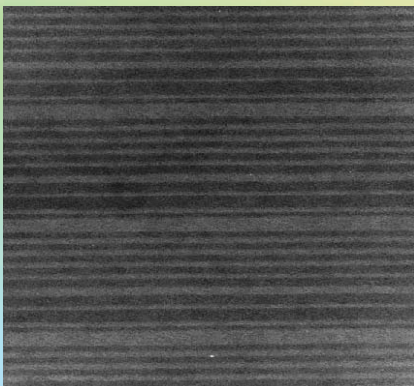


Bild 1: Transmissionselektronenmikroskopie-Aufnahme der aktiven Zone eines QCL (ca. 3 Perioden). Die Schichten aus AlGaAs (hell) und GaAs (dunkel) sind zwischen 2 und 6 nm breit (J. Raabe, Universität Regensburg)

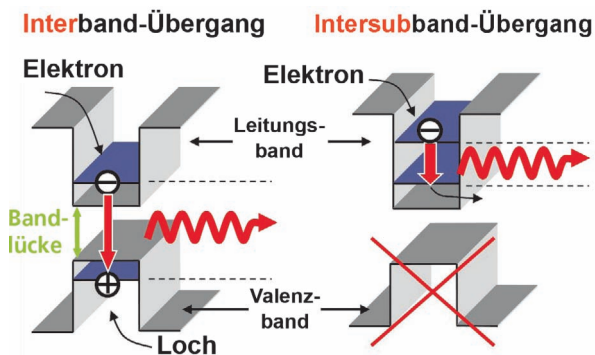


Bild 2: Interband- (herkömmlicher Halbleiterlaser) und Intersubband-Übergang (QCL) im Vergleich. Beim QCL ist die emittierte Wellenlänge unabhängig von der Bandlücke des Materials und hängt nur von den Schichtdicken ab (nach G. Scarpa, TU München)

4-12 μm). Mit Hilfe des TILDAS-Verfahrens (tunable infrared laser-diode absorption spectroscopy) lassen sich Moleküle wie CO , CO_2 , CH_4 , NH_3 , N_2O , SO_2 , O_3 , HNO_3 usw. spektral mit hoher Auflösung detektieren und ihre Konzentration quantitativ in Echtzeit bestimmen. In diesem Wellenlängenbereich (mittleres Infrarot) konkurrieren QCL mit Bleisalz-Lasern, haben aber wesentliche Vorteile wie z.B. den Betrieb bei Raumtemperatur. Im Terahertz-Bereich arbeiten die QCL noch nicht bei Raumtemperatur. Dies wäre wünschenswert, um das große Potenzial im Bereich der Sicherheitstechnik zu erschließen, denn mit THz-Strahlen lassen sich Metallgegenstände, die versteckt unter der Kleidung getragen werden, sehr leicht identifizieren. Intensiv wird auch an der Realisierung eines QCL auf Silizium-Germanium-Basis gearbeitet, der mit herkömmlicher CMOS-Technik kompatibel wäre.

Funktionsweise eines Quantenkaskadenlasers

Herkömmliche Quantentrog-Laser erzeugen Photonen durch die Rekombination von Elektron und Loch (Interband-Übergang), weshalb ihre Wellenlänge maßgeblich von der Bandlücke des verwendeten Halbleitermaterials abhängt. Dagegen sind QCL unabhängig von der Bandlücke. Sie erzeugen Photonen durch Intersubband-Übergänge, also durch Übergänge innerhalb des Leitungsbands (Bild 2). Aus diesem Grund kann die Wellenlänge des Lasers innerhalb eines gewissen Wellenlängenbereichs (mittleres und fernes Infrarot bzw. THz-Bereich) durch geeignete Wahl der Schichtdicken prinzipiell beliebig variiert werden. Eine weitere Besonderheit ist, dass der Stromtransport nur durch eine Sorte von Ladungsträgern erfolgt (zumeist der Elektronen), während in Quantentrog-Lasern sowohl Elektronen als auch Löcher zum Strom beitragen und daher komplizierte Mehrteilcheneffekte wie Exzitonen (Elektron-Loch-Paare) mit berücksichtigt werden müssen. Als idea-

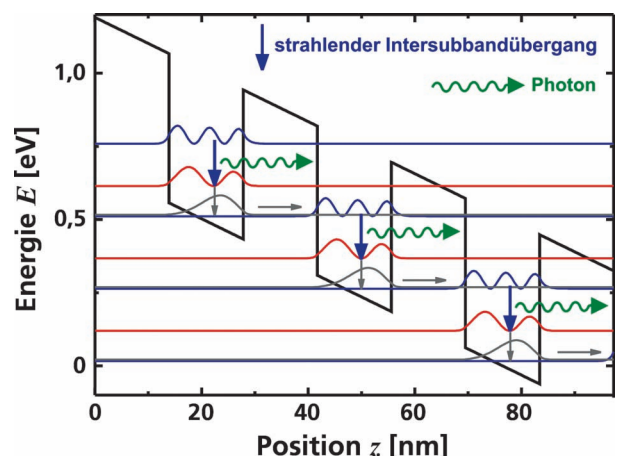
lisiertes Modell eines Quantenkaskadenlasers wird häufig die eindimensionale Schrödinger-Gleichung verwendet

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_c(z)} \frac{\partial}{\partial z} + E_c(z) \right) \psi_n(z) = E_n \psi_n(z) \quad (1)$$

wobei m_c die materialabhängige effektive Elektronenmasse, E_c die Leitungsbandkante (inklusive elektrisches Feld) und \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum repräsentieren. Als Lösung dieser Gleichung erhält man die Energien E_n (Eigenwerte) und Wellenfunktionen ψ_n (Eigenfunktionen) der n Elektronenzustände. Bild 3 zeigt die mit der nextnano³-Software berechneten¹ Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Elektronen für eine einfache Quantenkaskadenstruktur, die aus drei Quantentöpfen besteht und durch ein konstantes elektrisches Feld verkippt ist, was dem Anlegen einer Spannung entspricht. Pfeile deuten an, wie das Elektron dem elektrischen Feld von links nach rechts in niedrigere Energiezustände folgt, und zwar durch strahlende (blaue Pfeile) und nichtstrahlende (graue Pfeile) Übergänge. Der Grundzu-

¹ Eine Demo-Version der nextnano³-Software mit dieser QCL-Struktur als Beispiel kann unter Webcode 1903 heruntergeladen werden

Bild 3: Leitungsbandverlauf einer Quantenkaskadenstruktur bei 89 kV/cm elektrischer Feldstärke und zugehörige Wellenfunktionen der Elektronenzustände (ψ^2). Für effizientes Tunneln ist der unterste Zustand eines jeden Quantentopfs energetisch in Resonanz gebracht zum obersten Zustand des nachfolgenden Quantentopfs. Blauer Pfeil: strahlender Intersubband-Übergang, grauer Pfeil: nichtstrahlender Übergang



stand (grau) eines jeden Quantentopfs ist dabei mit dem angeregten Zustand (blau) des nachfolgenden Topfs bezüglich der Energie in Resonanz gebracht. Dies führt dazu, dass ein Elektron im Grundzustand in den angeregten Zustand im Nachbartopf tunneln kann, d.h. ein Elektron kann in jeder Periode ein Photon erzeugen und „kaskadiert“ dann zur nächsten Periode. Typischerweise verwendet man ca. 30-200 Perioden für einen QCL. Essentiell für einen Laser ist eine möglichst ausgeprägte Besetzungsinversion. Dies bedeutet, dass höher liegende Niveaus deutlich stärker besetzt sein müssen als tiefer liegende. Eine zweite wesentliche Voraussetzung ist, dass das Elektron des höheren Niveaus strahlend und nicht thermisch in den tiefer liegenden Zustand übergeht. Die dafür maßgeblichen optischen Übergangswahrscheinlichkeiten werden mit nextnano³ aus den Wellenfunktionen berechnet. Durch Verwendung verschiedener Materialien und die Variation der Quantentopf- und Barrierenbreiten, sowie durch Anlegen variabler elektrischer Felder lassen sich Besetzungsinversion, Übergangswahrscheinlichkeit und emittierte Wellenlänge je nach Anforderungsoptimieren.

Realistische Simulation eines Quantenkaskadenlasers

Die einfache Lösung der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung ist numerisch sehr effizient und daher bestens geeignet, einen ersten Einblick in die Bauteileigenschaften zu gewähren. Die Realität des elektronischen Transports durch einen QCL ist allerdings erheblich komplizierter. Ein QCL besteht aus Schichten verschiedener Halbleiterkristalle. Daher bewegen sich die Elektronen nicht nur parallel zum in Wachstumsrichtung angelegten Feld,

sondern auch senkrecht dazu, also innerhalb der Schichten und damit in die Betrachtungsebene von Bild 3 hinein. Dies führt zu kontinuierlichen Energiespektren anstelle der diskreten Lösungen (E_n in Gl. (1)). Kein Schichtsystem aus Halbleiterkristallen ist vollkommen frei von Störstellen oder enthält vollkommen glatte Grenzflächen zwischen den Schichten. Diese „Fehler“ des Bauteils führen jedoch zu deutlichen (ortsabhängigen) Abweichungen des QCL von der idealisierten Darstellung in Gl. (1). Selbst unter idealen Laborbedingungen (bei endlichen Temperaturen) streuen die Elektronen zumindest an Gitterschwingungen (Phononen) und erfahren so Aufweitungen des diskreten Lösungsspektrums.

All diese Effekte lassen sich vollständig in der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen-Theorie (englisch: non-equilibrium Green's functions, NEGF) beschreiben, die um 1960 in etwa gleichzeitig von den US-Wissenschaftlern Schwinger, Kadanoff und Baym, sowie dem russischen Wissenschaftler Keldysh entwickelt wurde. Damit erhält man anstelle von diskreten Lösungen (Bild 3) nun im Ort und in der Energie verschmierte Maxima der elektronischen Aufenthaltswahrscheinlichkeit (lokale Zustandsdichte). **Bild 4** zeigt dies für die Simulation der aktiven Periode eines AlGaAs/GaAs-THz-Lasers im strahlenden Betrieb. Die durchgezogene weiße Linie zeigt den Leitungsbandverlauf $E_c(z)$. Durch die realistische Breite (bezüglich

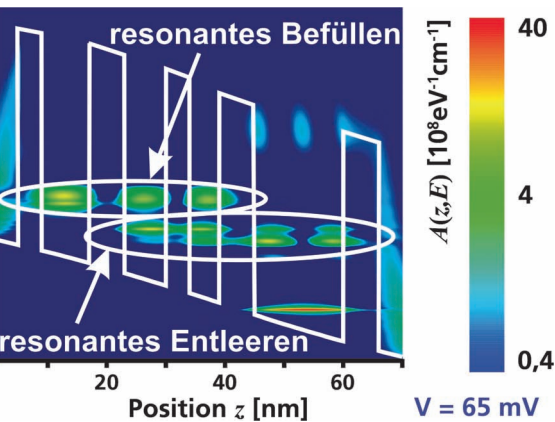


Bild 4: Konturdarstellung der energieaufgelösten lokalen Zustandsdichte $A(z,E)$ als Funktion der Position z und der Energie E . Die weiße Linie stellt das selbstkonsistent berechnete Leitungsbandprofil dar. Die angelegte Spannung beträgt 65 mV. Man sieht deutlich, dass die Zustände in der aktiven Zone (Mitte) resonant befüllt und entleert werden können

der Energie E) der Zustände muss für das resonante Füllen des oberen Laserniveaus und das Entleeren des unteren Niveaus die Energie weit weniger exakt angeglichen sein als bei Verwendung der idealisierten Schrödinger-Gleichung. Der tatsächliche Spannungsbereich, in dem ein QCL funktionieren kann, wird so erst durch die realistische Rechnung einsehbar.

Ein weiterer wichtiger Punkt für alle QCL-Charakteristika ist die realistische Bestimmung der Elektronendichte, d.h. die Besetzung der Zustände. Anders als beim idealisierten Modell ist dies mit der NEGF-Methode berechenbar [3]. So sieht man in **Bild 5** die Konturdarstellung der Elektronendichte in Abhängigkeit der

Wachstumscoordinate z und der elektronischen Energie E in der gleichen Situation wie in Bild 4. In der Mitte des Bauteils ist klar die ausgeprägte Besetzungsinversion zu erkennen, d.h. es befinden sich deutlich mehr Elektronen im energetisch höheren Niveau als im darunterliegenden. Folglich können dort die Elektronen unter Emission von Photonen in das untere Niveau übergehen und somit das optische Laserfeld verstärken. Dies wird in **Bild 6** verdeutlicht, das den berechneten optischen Absorptionskoeffizienten des gleichen Bauteils in Abhängigkeit von der Wachstumscoordinate z und der Photonenenergie zeigt. An der Stelle der Besetzungsinversion ist der Absorptionskoeffizient negativ,

daher werden nur dort mehr Photonen emittiert als absorbiert. Die gepunktete Linie entspricht der gemessenen Wellenlänge des Lasers und deckt sich sehr gut mit der berechneten. Dank dieser realistischen Methode stimmt außerdem die Strom-Spannungskurve gut mit dem Experiment überein. **Bild 7** vergleicht die gemessene Stromdichte (schwarz) mit Ergebnissen der NEGF-Berechnungen (Simulation: Strom durch 1 Periode, Experiment: Strom durch 175 Perioden). Es ist deutlich zu erkennen, dass nur die exakte Berücksichtigung aller relevanten Streumechanismen (rote Kurve) eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment [4] liefert. Rechnungen mit idealisierten glatten Grenzflächen (blau) oder einem

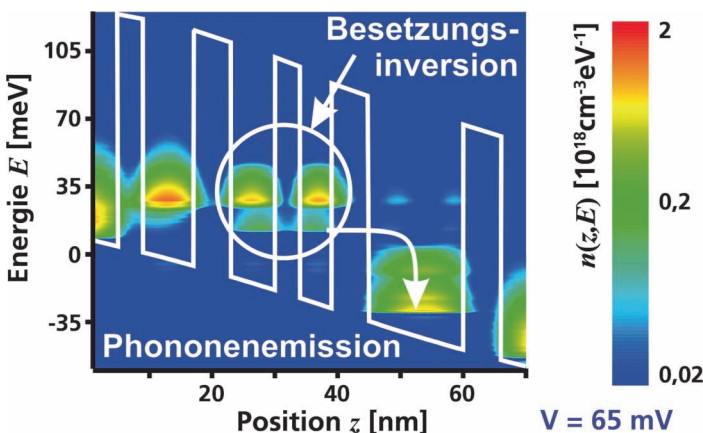


Bild 5: Konturdarstellung der energieaufgelösten Elektronendichte $n(z,E)$ des QCL. Die Besetzungsinversion der elektronischen Zustände im zentralen Doppel-Quantentopf ist deutlich zu erkennen: Das obere Laserniveau hat eine höhere Dichte als das untere, welches durch resonante Phononenstreuung (Pfeil) effizient entleert wird

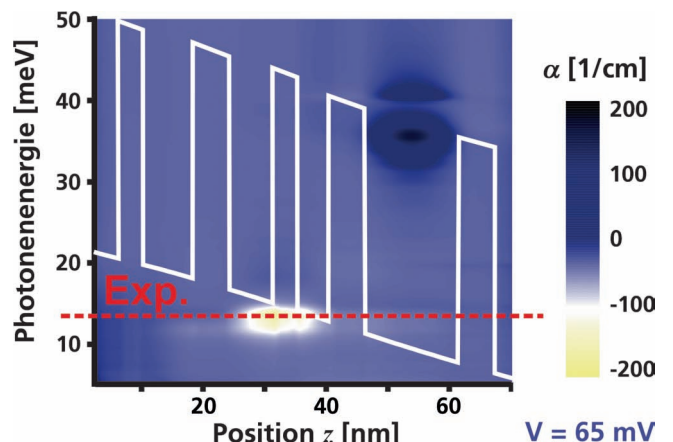


Bild 6: Konturdarstellung des Absorptionskoeffizienten $\alpha(z,\hbar\omega)$ als Funktion der Position z und der Photonenenergie $\hbar\omega$. Die rote Linie markiert die Energie der experimentell gemessenen Photonenemissionslinie. Das Leitungsbandprofil (weiß) dient nur zur Orientierung

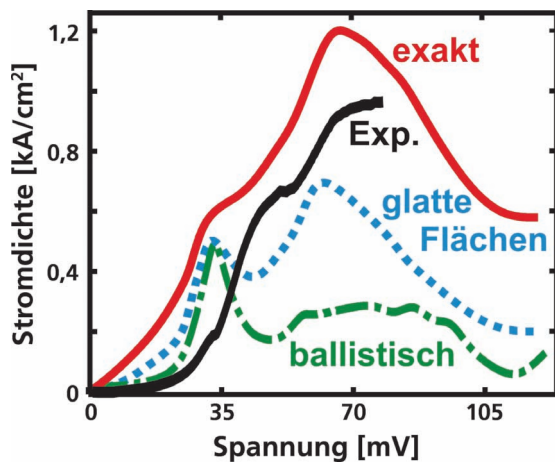


Bild 7: Strom-Spannungskennlinie des THz-QCL bei 100 K Temperatur. Die exakte Berechnung (rot) kommt dem Experiment aus [4] (schwarz) recht nahe, während bei der Berechnung mit glatten Grenzflächen (blau) und bei der ballistischen Berechnung (d.h. alle Streumechanismen werden vernachlässigt, grün) starke Abweichungen auftreten

vollkommen störungsfreien Bauteil (ballistische Kurve in grün) weichen qualitativ von der Realität ab. Bei der roten Kurve wurden relativ raue Grenzflächen angenommen, um den Unterschied zu den glatten Grenzflächen zu verdeutlichen. Die tatsächliche Rauigkeit liegt dazwischen. Im Experiment ($T=5\text{ K}$) steigt die Temperatur im Bauelement stark an, sobald Lasertätigkeit einsetzt. Der genaue Temperaturverlauf als Funktion der Spannung ist experimentell äußerst schwer zugänglich, daher wurde in der Simulation $T=100\text{ K}$ angenommen. Die Rechenzeit beträgt etwa einen Tag pro Spannungspunkt. Mit der NEGF-Methode erhält man experimentell nicht zugängliche Informationen (Bild 4, 5 und 6), die zum Verständnis

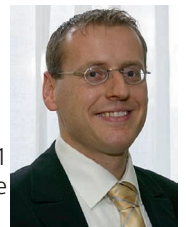
der Bauteilphysik wichtig sind. Dadurch lassen sich die Eigenschaften von Quantenkaskadenlasern bereits vor der Herstellung vorhersagen und für die jeweilige Anwendung optimieren.

Literatur

- [1] R.F. Kazarinov, R.A. Suris, *Possibility of the amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice*, Soviet Physics - Semiconductors 5 (4), 707 (1971)
- [2] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, A.Y. Cho, *Quantum Cascade Laser*, Science 264, 553 (1994)
- [3] T. Kubis, C. Yeh, P. Vogl, *Quantum theory of transport and optical gain in quantum cascade lasers*, physica status solidi (c), 5 (1), 232 (2008)
- [4] H. Callebaut, S. Kumar, B.S. Williams, Q. Hu, J.L. Reno, *Analysis of transport properties of terahertz quantum cascade lasers*, Applied Physics Letters 83 (2), 207 (2003)

Kontakt

Stefan Birner
 nextnano³
 Frauenmantelanger 21
 D-80937 München
 Tel. 089/444461197
 Fax 01803/505415110321
 stefan.birner@nextnano.de
 www.nextnano.de



Tillmann Kubis
 Walter Schottky Institut
 und Physik Department
 TU München
 Am Coulombwall 3
 D-85748 Garching
 Tel. 089/289-12762
 Fax 089/289-12737
 tillmann.kubis@wsi.tum.de
 www.wsi.tum.de/T33



Prof. Dr. Peter Vogl
 Walter Schottky Institut
 und Physik Department
 TU München
 Am Coulombwall 3
 D-85748 Garching
 Tel. 089/289-12750
 Fax 089/289-12737
 peter.vogl@wsi.tum.de
 www.wsi.tum.de/T33

