

# GaN基光子晶体发光二极管的优化设计

刘丹 童爱红 肖明 王筠 胡森

湖北第二师范学院物理与机电工程学院, 湖北 武汉 430205

**摘要** 构建了基于空气孔型 GaN 平板光子晶体(PC)的层状发光二极管(LED)模型。基于平面波展开方法,得到了空气孔型平板光子晶体的能带结构,分析了空气孔半径对禁带宽度的影响,得出最大禁带宽度约为 21.5%。设置电偶极子位于 GaN 介质层的中心,并在  $x-y$  平面内极化,辐射源采用高斯形脉冲,波长取为 450 nm,采用三维的时域有限差分法计算 LED 的出光效率,讨论了平板光子晶体的厚度和空气孔的半径对层状 LED 的相对出光效率的影响,结果表明:存在最优结构参数值获得最高的相对出光效率,其值约为 2。

**关键词** 光学器件;发光二极管;时域有限差分法;光子晶体;光子禁带

**中图分类号** O431 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/LOP51.122303

## Optimizing Design for GaN-Based Light Emitting Diodes with Photonic Crystal Slab

Liu Dan Tong Aihong Xiao Ming Wang Yun Hu Sen

*Department of Physics and Mechanical & Electrical Engineering, Hubei University of Education,  
Wuhan, Hubei 430205, China*

**Abstract** Layered light-emitting diode (LED) of GaN photonic crystal (PC) with periodic air holes is studied. Photonic band structures of the photonic crystal are obtained by plane-wave expansion method. The effects of air-hole radius on band gaps are analyzed, and the results show that the widest band gap is 21.5%. A point dipole polarized in the  $x-y$  plane is located in the center of the second GaN layer and is excited by a Gaussian pulse profile for the wavelength of 450 nm. Based on the three-dimensional finite-difference time-domain method, extraction efficiency of the LED is obtained. The effects of the PC thickness and air-hole radius on relative extraction efficiency of layered GaN-LED are analyzed. The results show that the maximum relative extraction efficiency of 2 can be obtained with the optimal structural parameters.

**Key words** optical devices; light emitting diode; finite-difference time-domain method; photonic crystal; photonic band gap

**OCIS codes** 260.2110; 160.5293; 230.5298; 230.3670

## 1 引言

发光二极管(LED)自诞生以来,被广泛地应用于显示器及照明之中。GaN 蓝光 LED 的出现,使得白光 LED 的梦终成现实,有望成为“绿色光源”<sup>[1-2]</sup>,但是为了满足大功率、高效率的要求,还要克服很多困难。LED 的内量子效率几乎可以达到 100%,但外量子效率却一直不高,一般只有 3%左右<sup>[3]</sup>,这主要是因为全内反射效应的影响。LED 的低出光效率限制了其应用范围,如何提高 LED 的出光效率一直是科学研究的热点。人们采用了多种措施来提高 LED 的出光效率,如生长分布式布拉格反射层、制作透明衬底、表面粗化、引入光子晶体(PC)或做成倒装芯片等。光子晶体自提出以来,就被用来实现高效发光二极管、光子晶体光纤、慢光波导、全光开关及光子晶体激光器等<sup>[4-11]</sup>。光子晶体因周期性结构的影响,能在发射区的周围阻断波导模,并使光改变方向进入辐射模,因此被用来增强 LED 的出光效率,被认为是一种很有发展前途的 LED 器件<sup>[12-21]</sup>。

迄今为止,已经有很多科研小组致力于利用光子晶体来提高 LED 的出光效率。2009年初,Wierer 等<sup>[2]</sup>

收稿日期: 2014-07-18; 收到修改稿日期: 2014-08-11; 网络出版日期: 2014-11-26

基金项目: 国家自然科学基金理论物理专款项目(11347189)、湖北省自然科学基金(2013CFB015)

作者简介: 刘丹(1981—),女,博士,讲师,主要从事光子晶体理论及应用等方面的研究。E-mail: liudan725@126.com

在 GaN 基 LED 上直接刻蚀出三角晶格光子晶体结构,光提取效率高达 73%,这是当时制作出的光提取效率最高的 PC-LED,且最高亮度是一般 LED 的 2 倍。2012 年, Gao 等<sup>[22]</sup>设计了一种双层光子晶体 GaN 基 LED,引入了低折射率限制层,发现这种限制层不仅可以抑制能量向 GaN 层中泄漏,同时使它与顶部光子晶体的耦合进一步增强,出光效率获得了大大地增强。同年, Byeon 等<sup>[23]</sup>用紫外(UV)纳米压印光刻工艺制备了基于氮化硅光子晶体的 GaN 基 LED,分析发现基于氮化硅光子晶体的 LED 比无光子晶体的 LED 的电致发光强度增强了 19%。2013 年, Shen 等<sup>[24]</sup>用全息光刻技术制作了光子晶体发光二极管,并使用时域有限差分法(FDTD)的方法研究了表面型及嵌入型光子晶体 LED 的光提取效率,通过优化设计,出光效率增强了 88.3%。在理论研究方面,绝大多数的研究工作注重分析结构参数对光子禁带的影响,希望获得宽的光子禁带,然而,直接分析光子晶体结构参数对光子晶体 LED 的出光效率影响的研究并不多。

本文构建了基于空气孔型 GaN 平板光子晶体的层状 LED 模型。首先基于平面波展开方法(PWM),得到了空气孔型平板光子晶体的能带结构,分析了空气孔半径对禁带宽度的影响,发现空气孔半径存在一个最佳值使得禁带最宽。其次采用三维 FDTD 计算 LED 的出光效率,讨论了平板光子晶体的厚度、空气孔的半径对层状 LED 的相对出光效率的影响,结果表明:存在最优结构参数值获得高的出光效率。研究结果为高出光效率的光子晶体 LED 的设计提供了理论参考。

## 2 模型及分析方法

建立了一个层状空气孔型 GaN 基平板光子晶体 LED 模型,如图 1 所示,其中“\*”代表位于第二层 GaN 介质板中心的电偶极子。LED 结构的最上面一层,是三角排列的空气孔型平板光子晶体,其基底材料选取的是 GaN(折射率为 2.4);将电偶极子放置于第二层 GaN 介质板的中间,用其模拟点光源,并在  $x-y$  平面内极化,辐射源采用高斯形脉冲;采用了折射率为 1.77 的蓝宝石衬底。设空气孔型 GaN 平板光子晶体的厚度为  $h$ ,晶格常数为  $a$ ,空气孔的半径为  $r$ 。

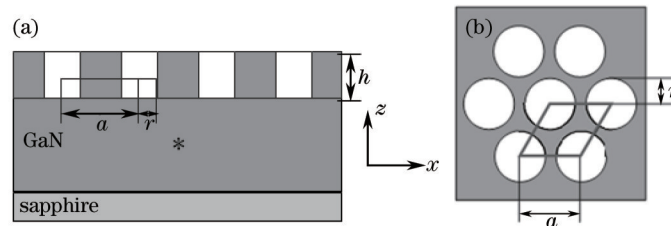


图 1 层状 GaN-LED 模型的(a)侧视图及(b)俯视图

Fig.1 (a) Side view and (b) top view of layered GaN-LED model

采用 PWM 方法计算光子晶体的能带结构,在光子禁带频率附近,计算的误差小于 2%。平板型光子晶体能带图有别于二维光子晶体的最重要的特征,就是具有“光锥”。在均匀的背景区域中,光锥线就是波矢除以折射率,即图 2 中标注的“light line”。光锥线以上,也即“光锥内”,表示的是一些连续态,即指包含背景中所有可能频率的连续性区域,即“泄漏模式”。光锥线以下,不连续的能带代表的是“传导模式”,简称“导模”,这些态不能和背景中的态耦合,只能在平板内无损耗地传播,一旦进入背景区域,将呈指数衰减,好似全内反射机制一样。图 2 中用实心圆和空心圆来代表导模。导模可按过平板中心的水平对称面( $z=0$  平面)的反演是奇对称还是偶对称,而分为奇模和偶模。奇模和偶模分别与二维情形下的 TM 模和 TE 模类似,常称为“类 TM 模式”和“类 TE 模式”<sup>[6]</sup>,图 2 中用实心圆代表类 TE 模式,空心圆代表类 TM 模式。

LED 出光效率的计算需采用三维 FDTD 方法<sup>[6]</sup>,将电偶极子放置于第二层 GaN 介质板的中间,用其模拟点光源,并在  $x-y$  平面内极化,辐射源采用高斯形脉冲,通过探测电偶极子处及 LED 结构的上表面的电磁场能流得出 LED 的出光效率。此处,为了反映光子晶体结构对 LED 的出光效率的影响,层状的 GaN 平板光子晶体 LED 模型的出光效率用相对出光效率来表示。相对出光效率定义为  $\eta = E_{\text{pc}}/E_{\text{noPC}}$ ,其中  $E_{\text{noPC}}$  表示没有 PC 结构时 LED 的出光效率,  $E_{\text{pc}}$  表示覆盖有 PC 结构的 LED 的出光效率。因此相对出光效率的取值,可以更清晰地反映光子晶体结构增强了 LED 的出光效率。对于周期性结构,同时考虑计算能力的限制,通常选取一个周期单元作为仿真计算区域。模拟中截取了  $x-y$  平面  $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$  的计算单元。为了能够精确还

原,在 $x$ - $y$ 平面四边设置了反射边界,并且在光子到达像素边界所需的平均时间上对能量进行积分,同时在 $z$ 轴设置完全匹配层(PML)吸收边界条件<sup>[6]</sup>。

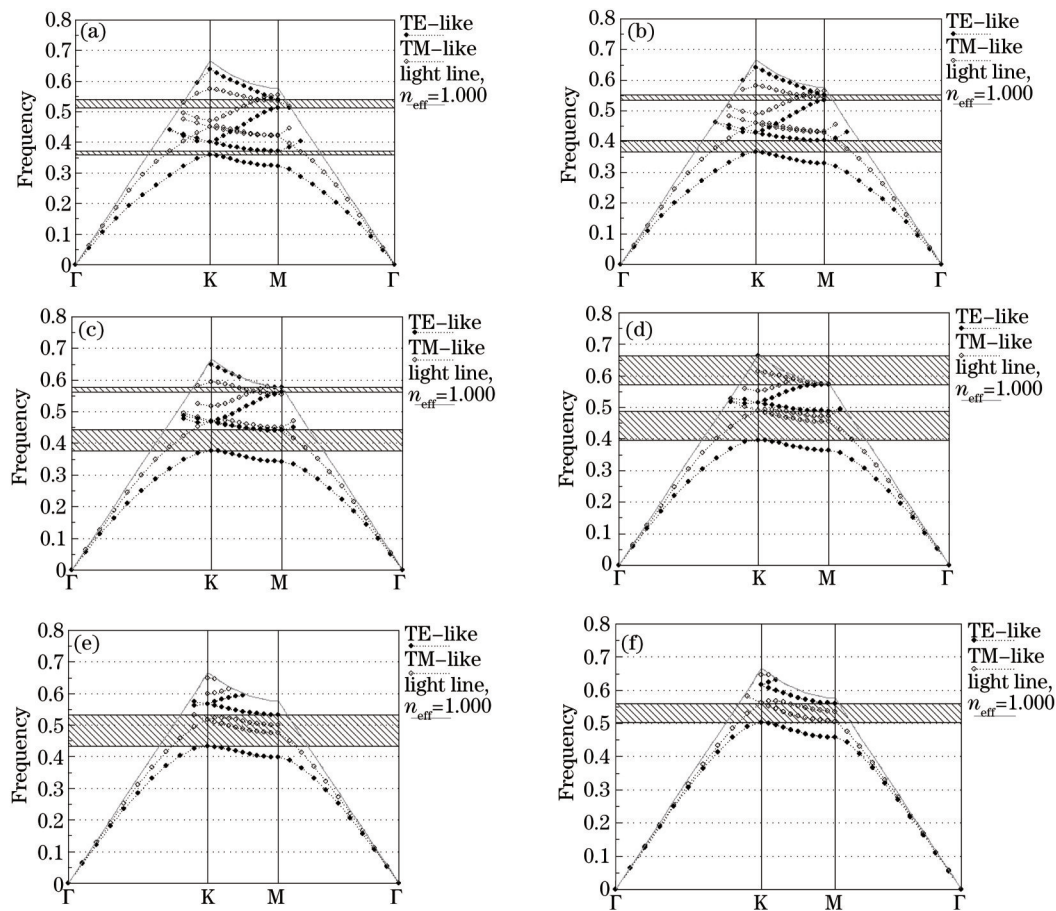


图2 空气孔半径取不同值时的能带曲线。(a)  $r=0.2a$ ; (b)  $r=0.25a$ ; (c)  $r=0.3a$ ; (d)  $r=0.35a$ ; (e)  $r=0.4a$ ; (f)  $r=0.45a$   
 Fig.2 Band diagrams for different air-hole radiuses. (a)  $r=0.2a$ ; (b)  $r=0.25a$ ; (c)  $r=0.3a$ ; (d)  $r=0.35a$ ;  
 (e)  $r=0.4a$ ; (f)  $r=0.45a$

### 3 能带分析

通常,在LED的表面刻蚀光子晶体即是引入平板光子晶体结构,可利用光子晶体的光子禁带阻止光在平板内传输,宽的光子禁带有利于使LED发光主波长落在光子禁带内,从而抑制光的横向传播,使得导波光可以发射出来,从而提高LED的出光效率。平板光子晶体的结构参数对禁带宽度有较大影响,最大禁带宽度取决于最佳结构参数值。要想获得高的LED的出光效率,就必须选择合适的结构参数。因此,首先分析层状的Ga<sub>N</sub>平板光子晶体LED模型的最上面PC层的能带特性。取PC板厚度 $h=0.5a$ ,得到不同空气孔半径下的平板光子晶体能带图,进一步分析获得禁带宽度随空气孔半径的变化关系。

将空气孔半径 $r$ 由小依次增大,通过平面波方法计算获得当 $r$ 分别取值为 $0.2a$ 、 $0.25a$ 、 $0.3a$ 、 $0.35a$ 、 $0.4a$ 及 $0.45a$ 时的能带曲线,如图2所示。图中实心圆代表类TE模式,空心圆代表类TM模式,阴影部分表示的是类TE禁带区域。需指出的是,此处所指的禁带与二维光子晶体的禁带完全不同,禁带只是针对导模来讲的,而不包括光锥内的“泄漏模式”。对于空气孔型Ga<sub>N</sub>平板光子晶体的能带曲线,特别关注“类TE模式”,因为LED的量子阱中心发出的光具有类似的偏振方式。

由图3可明显看出,空气孔型平板光子晶体容易产生类TE禁带,由于LED的光源发出的光类似于“TE模式”,因此空气孔型平板光子晶体结构常用于LED结构中,来提高其出光效率。另外,图中显示空气孔半径 $r$ 对光子晶体的禁带有较大影响,随着空气孔半径 $r$ 的增大,TE禁带宽度呈现先增大后减小的变化趋势。此处以第一TE禁带为代表,讨论了其禁带宽度随空气孔半径 $r$ 的变化关系,如图3所示。禁带宽度采

用归一化频率值来表示,即:  $\Delta\omega/\omega_m$ , 表示光子晶体的能带结构的无标度性。其中  $\omega_m$  表示的禁带所对应的中心频率值,而  $\Delta\omega$  表示的是禁带所对应的频率宽度。

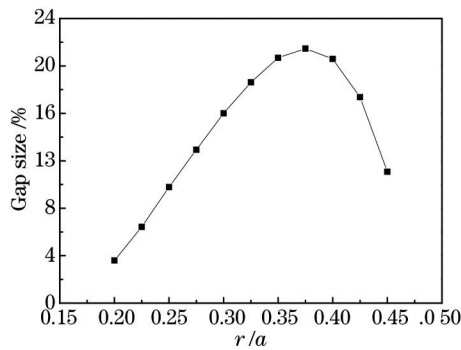


图3 GaN平板光子晶体的第一TE禁带宽度随空气孔半径的变化曲线

Fig.3 First TE band gap of the GaN PC slab as a function of the air-hole radius

由图3可知,当空气孔半径  $r$  由小依次增大时,禁带宽度由约4%急剧增大,且  $r=0.375a$  时,禁带最宽,值约为21.47%,随后又迅速减小。由此可见,空气孔半径存在一个最佳值使得禁带最宽,这主要是因为当空气孔半径变化时,光子晶体的介质填充率依次变化,而一般来说,介质填充率存在一个最佳值使得禁带最宽<sup>[5]</sup>。

#### 4 相对出光效率分析

采用三维FDTD结合PML完美匹配边界条件来计算层状GaN基PC-LED的相对出光效率,模型结构如图1所示。此处,取发光中心波长为450 nm,光子晶体结构的晶格常数为  $a=700$  nm,空气孔半径  $r=0.45a$  且PC厚度  $h=0.5a$ 。GaN介质层及衬底的厚度分别为  $2a$  及  $a$ 。

首先取晶格常数为  $a=700$  nm,空气孔半径  $r=0.45a$ ,讨论相对出光效率随PC厚度的变化曲线,如图4(a)所示。当PC的厚度值由0.1  $\mu\text{m}$  增至0.35  $\mu\text{m}$ ,相对出光效率先增大,并且当  $h$  增至0.2  $\mu\text{m}$  时,相对出光效率达到最大值1.97,随后,当  $h$  继续增大时,相对出光效率却缓慢减小。平板光子晶体的厚度对其禁带宽度影响较大,一般认为:如果平板太薄,则它的存在只能提供一个在背景介电常数上的微扰,导模仍然存在,但它们处于光锥线附近,即使是微小的扰动,就能使它们耦合到背景中去,不再被限制在平板内传播。此时,任何禁带都是很微小的;如果平板太厚,只需要很小的能量就能使高阶的纵模建立起来,这些模式的能量稍高于低阶模式,从而阻止了禁带的形成<sup>[6]</sup>。因此,对于PC-LED来讲,光子晶体厚度值太大或太小都不合适,而从图4可以看出,当PC的厚度大约为0.2  $\mu\text{m}$  时,相对出光效率的值已经足够大,并且在实验工艺中也较易实现<sup>[2]</sup>。其次取晶格常数为  $a=700$  nm,PC厚度  $h=0.5a$ ,讨论相对出光效率随空气孔半径的变化曲线,如图4(b)所示。 $r$  的取值由  $0.1a$  开始,为避免相邻的空气孔相互重叠,取空气孔半径  $r$  的最大值为  $0.5a$ 。由图可以得到,当空气孔半径太小或者太大时,相对出光效率都较低,当空气孔半径由  $0.1a$  增至  $0.4a$  时,相对出光效率值随半径几乎线性增长,且当  $r$  增至  $0.4a$  时,相对出光效率为1.86,当  $r$  继续增大至  $0.45a$  时,相对出光效率约有下降。将其与图3对照可知,改变了空气孔半径  $r$  的值,介质的填充率会随之发生变化,一般来讲,介质的填充率存在一个峰值对应宽的光子禁带,而宽的光子禁带将更有利于提高PC-LED的出光效率。

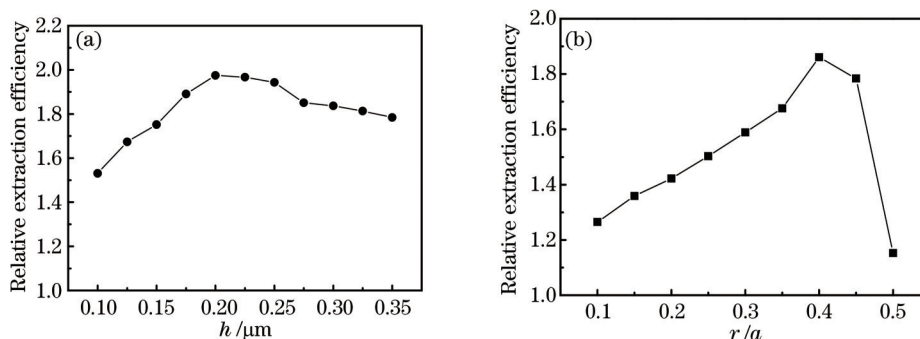


图4 相对出光效率随(a)光子晶体厚度和(b)空气孔半径的变化曲线

Fig.4 Relative extraction efficiency as a function of (a) thickness of PC and (b) air-hole radius

## 5 结 论

构建了基于空气孔型 GaN 平板光子晶体的层状 LED 模型。基于平面波展开方法,得到了空气孔型平板光子晶体的能带结构,分析了空气孔半径对禁带宽度的影响,发现空气孔半径存在一个最佳值使得禁带最宽。设置电偶极子位于 GaN 介质层的中心,并在  $x$ - $y$  平面内极化,辐射源采用高斯形脉冲,波长取为 450 nm,采用三维 DTD 计算出光效率,分别讨论了平板光子晶体的厚度、空气孔的半径对层状 LED 的相对出光效率的影响。结果发现:当晶格常数及空气孔半径一定时,随着 PC 的厚度值由 0.1  $\mu\text{m}$  增至 0.2  $\mu\text{m}$  时,相对出光效率达到最大值,随后当  $h$  继续增大时,相对出光效率却缓慢减小;当晶格常数及平板厚度一定时,相对出光效率值随半径几乎线性增长,且当  $r$  增至  $0.4a$  时,相对出光效率达到最大,当  $r$  继续增大至  $0.45a$  时,相对出光效率约有所下降。若建立更真实的 LED 模型,讨论各结构参数对 LED 出光效率的影响,将有望获得更高的出光效率。研究结果为高效的光子晶体 LED 的设计提供了理论参考。

## 参 考 文 献

- 1 Nakamura S. The roles of structural imperfections in InGaN-based blue light-emitting diodes and laser diodes[J]. Science, 1998, 281(5379): 956-958.
- 2 Wierer J J, David A, Megens M M. III-nitride photonic-crystal light-emitting diodes with high extraction efficiency[J]. Nature Photonics, 2009, 3(3): 163-169.
- 3 Chen Libai, Guo Zhenning, Lin Jieben. Research progress of photonic crystal light-emitting diode[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2008, 15(4): 62-66.  
陈丽白, 郭震宁, 林介本. 光子晶体发光二极管的研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2008, 15(4): 62-66.
- 4 Yablonovitch E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(20): 2059-2062.
- 5 John S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(23): 2486-2489.
- 6 Joannopoulos D J, Mead D R, Winn N J. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light[M]. Princeton: Princeton University Press, 1995.
- 7 Zhang Wei, Wang Zhiyong, Wang Wenchao, *et al.*. Investigation on wideband slow light based on photonic-crystal coupled waveguides[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(2): 0213001.  
张 伟, 王智勇, 王文超, 等. 基于光子晶体耦合波导的宽带慢光研究[J]. 光学学报, 2012, 32(2): 0213001.
- 8 Zhang Liang, Zhang Wei, Nie Qiuhua, *et al.*. Research progress of two-dimensional photonic crystal waveguides[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(3): 030008.  
章 亮, 张 巍, 聂秋华, 等. 二维光子晶体波导研究进展[J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(3): 030008.
- 9 Zhou Fei, Fei Hongming, Chen Zhihui, *et al.*. A high efficiency photonic crystal polarization beam splitter[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2013, 50(6): 062304.  
周 飞, 费宏明, 陈智辉, 等. 一种高效光子晶体偏振光分束器[J]. 激光与光电子学进展, 2013, 50(6): 062304.
- 10 Li Hongbing, Jin Yanyun, Fang Jinghui, *et al.*. Temperature sensing of photonic crystal fiber filled with liquid via SBS [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2012, 49(12): 120602.  
李红兵, 金艳云, 方靖淮, 等. 基于 SBS 的填充液体的光子晶体光纤温度传感器[J]. 激光与光电子学进展, 2012, 49(12): 120602.
- 11 Chai Lu, Hu Minglie, Fang Xiaohui, *et al.*. Advances in femtosecond laser technologies with photonic crystal fibers[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(1): 0101001.  
柴 路, 胡明列, 方晓惠, 等. 光子晶体光纤飞秒激光技术研究进展[J]. 中国激光, 2013, 40(1): 0101001.
- 12 Cui Desheng, Guo Weiling, Cui Bifeng, *et al.*. Preparation and temperature-variation properties of high color rendering index LED[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(1): 0123005.  
崔德胜, 郭伟玲, 崔碧峰, 等. 高显色白光 LED 的制备及其变温特性[J]. 光学学报, 2012, 32(1): 0123005.
- 13 Liu Jinchuan, Jiang Wei, Li Shuping, *et al.*. Study of photonic band gap of 2D photonic crystals used in short-wavelength LED[J]. Acta Optica Sinica, 2012, 32(6): 0623006.  
刘金川, 姜 伟, 李书平, 等. 用于短波段发光二极管的二维光子晶体禁带研究[J]. 光学学报, 2012, 32(6): 0623006.
- 14 Kim D H, Cho C O, Roh Y G, *et al.*. Enhanced light extraction from GaN-based light-emitting diodes with holographi-

- cally generated two-dimensional photonic crystal patterns[J]. Appl Phys Lett, 2005, 87(20): 203508.
- 15 Shealy D L, Berg H M. Simulation of optical coupling from surface emitting LEDs[J]. Appl Opt, 1983, 22(11): 1722-1730.
- 16 Ting Z D, McGill T C. Monte Carlo simulation of light-emitting diode light-extraction characteristics[J]. Optical Engineering, 1995, 34(12): 3545-3553.
- 17 Borbely A, Johnson S G. Prediction of light extraction efficiency of LEDs by ray trace simulation[C]. SPIE, 2004, 5187: 301-308.
- 18 Shmatov O. Light extraction study of LED using ray tracing computer simulation[J]. Physica Status Solidi (c), 2007, 4(5): 1629-1632.
- 19 Zabelin V, Zakheim D A, Gurevich S A. Efficiency improvement of AlGaInN LEDs advanced by ray-tracing analysis[J]. IEEE Journal of Quantum Electronics, 2004, 40(12): 1675-1686.
- 20 Lee T X, Lin C Y, Ma S H, *et al.*. Analysis of position-dependent light extraction of GaN-based LEDs[J]. Optics Express, 2005, 13(11): 4175-4179.
- 21 Lee T X, Gao K F, Chien W T, *et al.*. Light extraction analysis of GaN-based light-emitting diodes with surface texture and/or patterned substrate[J]. Opt Express, 2007, 15(11): 6670-6676.
- 22 Gao H, Li K, Kong F M, *et al.*. Improving light extraction efficiency of GaN-based LEDs by AlxGauxN confining layer and embedded photonic crystals[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 2012, 18(6): 1650-1660.
- 23 Byeon K J, Cho J Y, Kim J. Fabrication of SiNx-based photonic crystals on GaN-based LED devices with patterned sapphire substrate by nanoimprint lithography[J]. Opt Express, 2012, 20(10): 11423-11432.
- 24 Shen X X, Ren Y Z, Dong G Y, *et al.*. Optimization design of holographic photonic crystal for improved light extraction efficiency of GaN LED[J]. Superlattices and Microstructures, 2013, 64: 303-310