

文章编号: 0253-2239(2010)01-0233-04

光子晶体结构参数的随机扰动对光子晶体 LED 出光效率的研究

陈 健 王庆康 李海华

(上海交通大学微纳科学技术研究院薄膜与微细技术教育部重点实验室、微米/纳米加工技术国家级重点实验室, 上海 200240)

摘要 利用光子晶体(PC)的光子禁带和光栅衍射效应可以提高发光二极管(LED)的出光效率,扩大 LED 的应用范围。在 GaN 基蓝光 LED 的 GaN 层上引入二维正方排列圆柱形 PC,采用时域有限差分方法研究光子晶体的几何参数的随机扰动对 LED 出光效率的影响,利用禁带理论分析了其机理。

关键词 光电子学;光子晶体;时域有限差分;发光二极管;禁带;随机扰动

中图分类号 O472 文献标识码 A doi: 10.3788/AOS20103001.0233

Effect of Random Perturbation of Structural Parameters on the Light Extraction Efficiency of Light Emitting Diode with Photonic Crystal

Chen Jian Wang Qingkang Li Haihua

(National Key Laboratory of Micro/Nano Fabrication Technology, Key Laboratory for Thin Film and Microfabrication Technology of Ministry of Education, Research Institute of Micro/Nano Science and Technology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract Using photonic bandgap of photonic crystals (PC) and the grating diffraction effect can improve the efficiency of the light from the light emitting diode (LED), it can expand the application scope of the LED. PC with square lattice of cylindrical unit cells are fabricated in GaN layer of GaN-based blue LED, the light extraction efficiency of GaN-based blue LED influenced by random perturbation of structural parameters are studied by finite-difference time-domain method and its mechanism is analyzed by the band gap theory.

Key words optoelectronics; photonic crystal; finite-difference time-domain (FDTD); light-emitting diode (LED); band gap; random perturbation

1 引 言

发光二极管(LED)是一种广泛应用于光电子领域的低成本长寿命固态光源,在液晶显示器(LCD)的背光照明、交通灯、汽车尾灯、一般照明和室外单色、全色显示设备上都有着广泛的应用^[1]。但是由于 LED 有源层的半导体材料与空气的高折射率,光在 LED 介质与空气的界面发生全反射,使得大部分光都不能从二极管中发射出来,被金属触点、基底或有源层吸收,产生热能或引起电子与空穴的无辐射复合^[2],导致出光效率受到很大的限制。如何提高

LED 的出光效率一直是研究的热点^[3~7]。

自 1987 年 E. Yablonovitch^[7] 提出光子晶体(PC)以来,光子晶体就引起了不同研究人员的兴趣。周期性分布的高低折射率电介质的特殊结构使光子晶体可用来增强自发辐射或提高固态光源的出光效率。光子晶体具有光子能带,带隙被用来禁止导波模式^[8],一方面这些导波模式直接被 PC 耦合成为辐射模式穿透 LED 而进入空气,另一方面,如果发光频率位于光子晶体禁带之上,PC 可以通过布拉格散射使这些模式耦合成为辐射模式^[9,10]。光子

收稿日期: 2008-12-11; 收到修改稿日期: 2009-04-03

基金项目: 上海市科委纳米技术专项基金(0752nm014)资助课题。

作者简介: 陈 健(1983—),男,博士研究生,主要从事纳米光学方面的研究。E-mail: cjmelo@sjtu.edu.cn

导师简介: 王庆康(1962—),男,教授,博士生导师,主要从事纳米光电子学、微纳制造工艺等方面的研究。

E-mail: wangqingkang@sjtu.edu.cn

本文彩色效果详见中国光学期刊网(<http://www.opticsjournal.net>)相关文章

晶体与 LED 恰当结合,可以通过光子晶体对光的衍射作用把限制在 LED 中的光释放出来。光子晶体还可以调整 LED 的角发射,使发射特性与实际需要相适应。

由于微加工过程中存在误差,造成光子晶体几何结构参数的偏差,必然会对 PC 的光学特性产生影响,从而影响 LED 的出光效率。本文在 GaN 层上引入二维正方排列圆柱形 PC,通过能带理论确定具有最大出光效率时的 PC 参数,采用时域有限差分(FDTD)^[11]方法研究 PC 的几何参数的随机扰动对 LED 出光效率的影响,对光子晶体发光二极管(PC-LED)^[12]的生产应用有一定的指导意义。

2 FDTD 算法与建模

FDTD 算法是求解电磁场 Maxwell 方程的通

$$E_x^{n+1}(i+1/2, j, k) = E_x^n(i+1/2, j, k) + \frac{\Delta t}{\epsilon(i+1/2, j, k+1/2)\delta} [H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2, k) - H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) + H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k-1/2)]$$

式中 $E_x^{n+1}(i+1/2, j, k)$ 表示网格点标号为 $(i+1/2, j, k)$ 处,第 $n+1$ 个时间步长电场分量 E_x 的值,其他场分量类似。 $\epsilon(i+1/2, j, k+1/2)$ 为 $(i+1/2, j, k+1/2)$ 处的介电常数, δ 为距离步长。模拟中截取了 xz - y 方

用方法。具体方法是:将 Maxwell 方程组在坐标系中展开成标量场分量的方程组,然后用二阶精度的中心差商代替微商,将连续的空间和时间问题离散化,得到标量场分量的迭代差分方程组;由数值稳定性条件和计算所考虑的光波长范围确定空间离散步长的大小,根据空间离散步长将光子晶体沿坐标轴向方向分成很多 Yee 氏网格单元。

求出每个网格点的有效介电常数,再由空间步长和时间步长所满足的数值稳定性条件,得出相应的时间步长。以上参数确定后加入边界条件后,就可以将迭代方程组在划分好的 Yee 氏网格空间中迭代计算出光子晶体中在任意时刻场的分布情况,并通过傅里叶变换,计算出包含很大频率范围的透射谱。

以直角坐标系中的三维 FDTD 迭代公式为例,见式^[13]

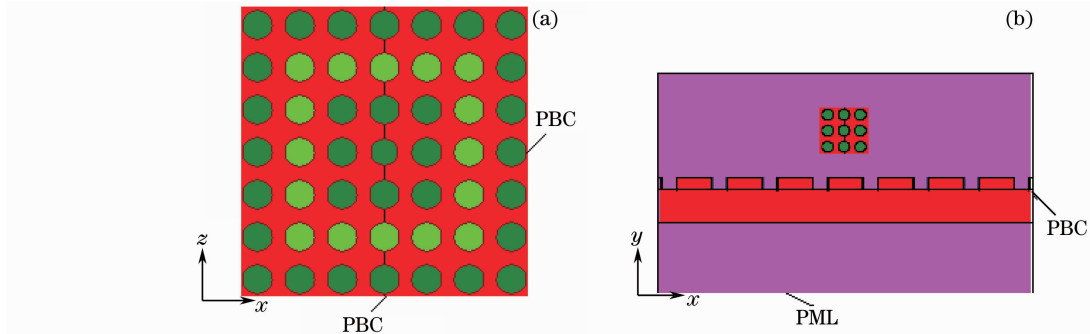


图 1 FDTD 边界条件。(a) xz 平面;(b) xy 平面

Fig. 1 FDTD boundary conditions. (a) xz plane; (b) xy plane

3 结果与分析

二维正方排列圆柱形 PC 结构如图 2 所示,其结构参数:周期 a ,半径 R ,占空比 $R_p = 2R/a$ 。LED 系统结构中 GaN 层的厚度为 300 nm。由薄膜理论可知,当膜层材料的光学厚度是入射波长的四分之一时有良好的增透效果。主要研究的中心波长 $\lambda_0 = 460$ nm,则 PC 的高度为 115 nm。通过计算,当 $R_p = 0.7$ 时,带隙个数最多,有四个禁带,如图 3 所

向 $2 \mu\text{m} \times 2.5 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$ 的计算单元即为图 1(a)中浅色所包含的区域。为了能够精确还原,在 xz 平面四边设置了周期性边界条件(PBC)^[14],在 y 轴方向设置了完全匹配层(PML)^[15],如图 1(b)所示。

示。两个 E 偏振带隙,两个 H 偏振带隙:0.313~0.344,0.527~0.571(TE),0.709~0.734,0.89~0.903(TM),禁带宽度分别是 0.031,0.044,0.025,0.013(a/λ),禁带中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 分别为:0.329,0.549,0.722,0.897。由于 GaN 基蓝光 LED 的发光波长为 460 nm,此时 PC 的周期 $a = f_0 \times \lambda$ 分别为 151.34,252.54,332.12 和 412.62 nm。根据实现工艺的难易程度,取 $a = 412$ nm,圆柱形 PC 的半

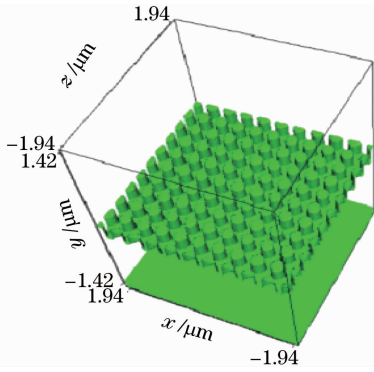


图 2 正方形排列的圆柱形 PC 结构三维视图

Fig. 2 Three-dimensional view of the PC with square lattice of cylindrical unit cells

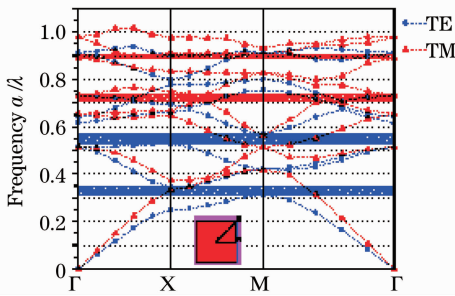


图 3 $R_p=0.7$ 时正方形排列的圆柱形 PC 的能级结构

Fig. 3 Bandgap structure of PC with square lattice of cylindrical unit cells when $R_p=0.7$

径 $R=144\text{ nm}$ 。

由于微加工工艺的误差,造成 PC 结构参数的随机扰动,PC 的半径与所设计的半径 R 会有偏差,加工后 PC 的半径为 r ,当某一 PC 的 $r/R \neq 1$ 时

定义为缺陷。在图 1(a)所示计算区域中具有缺陷的 PC 个数为 m ,则缺陷率为 $m/25 \times 100\%$,定义 r/R 来表征微加工造成 PC 半径偏差程度。本文研究 PC 缺陷个数 m 、半径偏差程度 r/R 对 GaN 基蓝光 LED 出光效率的影响,具有缺陷的 PC 是随机分布的。定义 PC-LED 出光效率减小程度 $\Delta\eta=(\eta_0-\eta)/\eta_0$,其中 η_0 为无缺陷时,PC-LED 的出光效率, η 为 PC 有缺陷时 PC-LED 的出光效率。定义 PC 亚波长结构 LED 相对出光效率 $E_r=E/E_0$, E 为该 PC 亚波长结构 LED 出光效率, E_0 为无 PC 亚波长结构 LED 出光效率。

图 4(a)为无缺陷时,PC 占空比对出光效率的影响,从图中可知,当 $R_p=0.7$ 时,有四个带隙,出光效率是最大的。图 4(b)为 PC 的缺陷个数 $m=1\sim 5$ 即缺陷率为 $4\%\sim 20\%$ 时, r/R 对出光效率的影响,图 4(b)是在 25 组态平均所得的结果。从图中可以看出,当 PC 没有缺陷即 $r/R=1$ 时,禁带个数是最多的,导致出光效率是最大的。当 PC 的半径 r 与 R 有偏差时,出光效率都有不同程度的减小。当 $m=1$,缺陷率为 4% 时,最多导致出光效率减少 17.5% ; $m=2$,缺陷率为 8% 时,最多导致出光效率减少 33.5% ; $m=3$,缺陷率为 16% 时,最多导致出光效率减少 39.6% ; $m=4$,缺陷率为 20% 时,最多导致出光效率减少 47.6% ; $m=5$ 时,最多导致出光效率减少 49.2% 。PC 缺陷率越大,LED 出光效率减小程度越大;PC 半径误差程度越大,LED 出光效率减小越多。

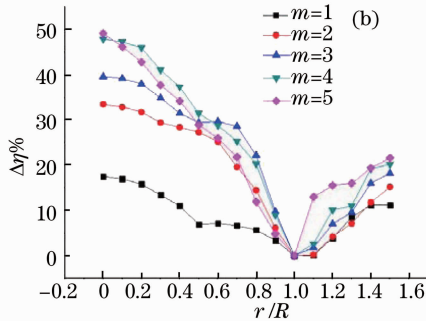
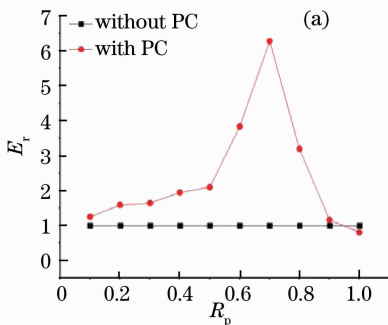


图 4 (a) 正方形排列圆柱形 PC 的 R_p 与 E_r 的关系,(b) $m=1\sim 5$ 时, r/R 与 $\Delta\eta\%$ 的关系曲线

Fig. 4 (a) Relation between R_p and E_r of PC with square lattice of cylindrical unit cells, (b) relation curve of r/R and $\Delta\eta\%$ when $m=1\sim 5$

图 5 为 $m=1$,缺陷率为 4% 时,半径的偏差程度 r/R 对 PC 能带结构的影响。从图中可以看出:当 $r=R$,即 PC 半径无偏差时,禁带个数最多,此时出光效率最大;当 $r/R=0.6$ 时,只有一个禁带,出

光效率此时有所减小;当 $r/R < 0.4$ 时,无禁带;当 $r/R > 1$ 时,也只有一个禁带,根据 PC 对 LED 出光效率的影响, $r/R > 1$ 时的出光效率高于 $r/R < 0.4$ 时的出光效率,与图 4(b)相符。可见 PC 光子禁带

对出光效率的提高有着至关重要的作用。

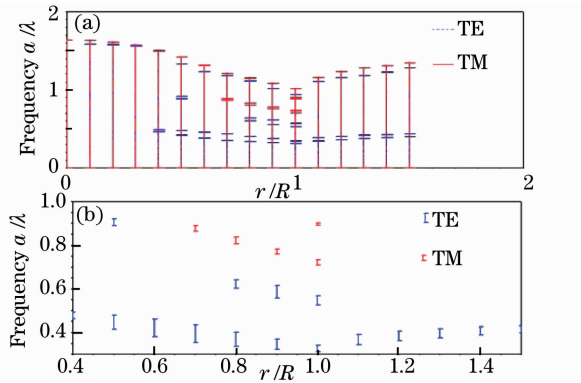


图 5 $m=1$ 时, r/R 与 PC 能带的关系。

(a) 能带结构; (b) 禁带结构

Fig. 5 Relation between r/R and energy band of PC as $m=1$

1. (a) structure of energy band; (b) structure of band gap

4 结 论

GaN 基蓝光 LED 在无 PC 时, 导波模式将会在全频域空间存在, 而在 GaN 界面引入周期性调制的 PC 结构后, 会引入一个导波的频率上限, 从而减少了导模, 增加漏波模式, 提高 LED 的出光效率。由于微加工过程中存在必然的偶然误差, PC 缺陷率越大, LED 出光效率减小程度越大; PC 半径误差程度越大, LED 出光效率减小程度越大。

参 考 文 献

- 1 Su Ping, Xu Zhenfeng, Gu Huarong *et al.*. Photonic crystal light emitting diode[J]. *Optical Technique*, 2007, **33**(4): 505~509
苏萍, 许振丰, 顾华荣等. 光子晶体发光二极管[J]. *光学技术*, 2007, **33**(4): 505~509
- 2 E. F. Schubert. Light Emitting Diodes[M]. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2003
- 3 M. Boroditsky, T. F. Kraus, R. Coccioli *et al.*. Light extraction from optically pumped light-emitting diode by thin-slab photonic crystals [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1999, **75**(8): 1036~1039

- 4 M. H. Szymanska, A. F. Hughes, E. R. Pike. Effect of a photonic band gap on the threshold and output power of solid-state lasers and light-emitting diodes [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **83**(1): 69~72
- 5 S. H. Fan, P. R. Villeneuve, J. D. Joannopoulos. Rate-equation analysis of output efficiency and modulation rate of photonic crystal light-emitting diodes [J]. *IEEE J. Quant. Electron.*, 2000, **36**(10): 1123~1130
- 6 B. J. Matterson, J. M. Lupton, A. F. Safonov *et al.*. Increased efficiency and controlled light output from a microstructured light-emitting diode [J]. *Adv. Mater.*, 2001, **13**(2): 123~127
- 7 E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in soldstate physics and electronics [J]. *Phy. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 8 Meng Qingsheng, Ouyang Zhengbiao, Wang Zhongchun *et al.*. Mode type and their related properties of one dimensional photonic crystal resonant cavity[J]. *Acta Optica Sinica*, 2007, **27**(7): 1290~1294
孟庆生, 欧阳征标, 王仲淳等. 一维光子晶体谐振腔的模式类型及其性质[J]. *光学学报*, 2007, **27**(7): 1290~1294
- 9 Aurélien David, Henri Benisty, Claude Weisbuch. Optimization of light-diffracting photonic-crystals for high extraction efficiency LEDs[J]. *J. Display Technol.*, 2007, **3**(2): 133~148
- 10 Marko Lončar, Theodor Doll, Jelena Vučković *et al.*. Design and fabrication of silicon photonic crystal optical waveguides[J]. *J. Lightwave Technol.*, 2000, **18**(10): 1402~1411
- 11 Feng Shangshen, Shen Linfang, He Sailing. A two-dimensional anisotropic photonic crystal with a large absolute band gap[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2003, **32**(2): 235~238
冯尚申, 沈林放, 何赛灵. 一种具有大带隙的各向异性二维光子晶体结构[J]. *光子学报*, 2003, **32**(2): 235~238
- 12 Shanhui Fan, J. D. Joannopoulos, E. F. Schubert. Photonic crystal light emitting diodes[C]. *SPIE*, **3002**: 67~73
- 13 Sun Zhihong. The study of the defect modes and coupling characteristics of photonic crystals[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(7): 984~989
孙志红. 光子晶体局域缺陷模及耦合特性研究[J]. *光学学报*, 2005, **25**(7): 984~989
- 14 G. Mur. Absorbing boundary conditions for the finite-difference approximation of the time domain electromagnetic field equations [J]. *IEEE Trans. Electromagnetic Compatibility*, 1981, **23**(4): 3777~3782
- 15 Zhang Bo. Absorbing boundary conditions for two-dimensional photonic crystal waveguides [J]. *Acta Physica Sinica*, 2005, **54**(12): 5677~5682
张波. 二维介质柱光子晶体波导吸收边界条件[J]. *物理学报*, 2005, **54**(12): 5677~5682