

# 用于短波段发光二极管的二维光子晶体禁带研究

刘金川 姜 伟 李书平 康俊勇

(厦门大学物理与机电工程学院, 福建 厦门 361000)

**摘要** 运用平面波展开法(PWE), 针对光子晶体在短波长段发光二极管(LED)领域上的应用, 主要选择高频禁带模式, 研究了 4 种具有较大应用潜力的二维光子晶体结构, 包括正方空气柱结构、三角空气柱结构、正方介质柱结构和三角介质柱结构。在不同晶格常数、占空比(AFF)、柱半径和晶格常数比下, 分析了 TE 模式和 TM 模式光子禁带的变化。数据分析表明, 光子禁带中心波长随 AFF 增加而变小。相比于其他结构, 正方介质柱结构更适于短波段光子晶体 LED 来提高其出光效率, 三角介质柱结构和三角空气柱结构适合于构造短波段偏振光 LED。

**关键词** 光学器件; 光子晶体; 发光二极管; 平面波展开法; 光子禁带

**中图分类号** O436; O472.3 **文献标识码** A **doi:** 10.3788/AOS201232.0623006

## Study of Photonic Band Gap of 2D Photonic Crystals Used in Short-Wavelength LED

Liu Jinchuan Jiang Wei Li Shuping Kang Junyong

(College of Physics and Mechanical and Electrical Engineering, Xiamen University, Xiamen, Fujian 361000, China)

**Abstract** Using plane wave expansion (PWE) method, four kinds of promising two-dimensional (2D) photonic crystals including square air holes, hexagonal air holes, square rods and hexagonal rods aiming at short-wavelength light emitting diode (LED) are studied. Transverse electric (TE) and transverse magnetic (TM) photonic band gaps (PBGs) are calculated under different lattice constants with different air filling fractions (AFFs) and ratios of pillar radius to lattice constant. The analysis of data indicates that the center wavelength of PBG increases with smaller AFF. Compared with other structures, the structure with square rods has more potential in improving the extraction efficiency of short-wavelength LED, while those with hexagonal rods and hexagonal air holes are suitable for structuring short-wavelength polarization LED.

**Key words** optical devices; photonic crystal; light emitting diode; plane wave expansion; photonic band gap

**OCIS codes** 050.5298; 230.3670; 230.5298; 160.5293

## 1 引 言

自 1987 年 Yablonovitch 等<sup>[1,2]</sup>将光子晶体的概念提出以来, 迅速引发了相关领域的关注并成为研究的热点。光子晶体中, 光子被折射率周期性变化的晶格散射形成光子禁带(PBG), 处于 PBG 模式中的光子无法传播。这一特性也被运用到发光二极管(LED)领域。LED 是一种低能耗、长寿命、高稳定性的固态光学器件, 在照明、显示以及光通信等领

域有着广泛的应用, 其中短波长特别是紫外波段 LED 在化学、生物及医疗领域有着巨大的应用潜力。目前 LED 内量子效率已经能做到接近 100%, 但是大部分的光都损失在表层形成导波模, 只有一小部分约  $1/4n^2$  出射出来( $n$  为折射率)。对于传统的 LED, 外量子效率的低下主要是因为 p 型层和空气界面发生的全内反射。GaN 的折射率远大于空气, 这一差异将导致在界面形成一个约  $24.6^\circ$  的临

**收稿日期:** 2011-12-12; **收到修改稿日期:** 2012-02-18

**基金项目:** 国家 863 计划(2011AA03A111)和国家自然科学基金(90921002)资助课题。

**作者简介:** 刘金川(1987—), 男, 硕士研究生, 主要从事蓝紫光发光二极管及其出光效率等方面的研究。

E-mail: ljcxmdx@126.com

**导师简介:** 李书平(1973—), 男, 教授, 硕士生导师, 主要从事半导体光电子材料与器件等方面的研究。

E-mail: lsp@xmu.edu.cn(通信联系人)

界逃逸锥面<sup>[3]</sup>。研究人员们提出了表面粗化<sup>[4]</sup>、倒装结构<sup>[5]</sup>等方法来改善 LED 的出光效率。

在 p-GaN 层上,可以通过纳米印刷技术<sup>[6]</sup>或者聚焦离子束技术<sup>[7]</sup>制造出二维光子晶体,形成二维上的 PBG 禁止光子在水平方向上的运动,且光子会与漏模产生耦合作用<sup>[8]</sup>,从而提高在垂直面方向上的出光效率<sup>[9]</sup>,还可以通过构造二维光子晶体结构来实现偏振光 LED,而这些应用都建立在 PBG 波段能够有效限制发光波段的基础之上。通过光子晶体提高 LED 出光效率已经得到验证<sup>[10,11]</sup>,但是多集中在长波段,在短波段甚至紫外波段还较少。很多学者对二维光子晶体多个方面进行了理论计算,包括光在介质柱阵列和空气柱阵列的传播特性研究<sup>[12]</sup>,超过 10 种晶格结构带隙,PBG 中心频率与填充比和几何形状的关系<sup>[13]</sup>,以及对正方晶格空气柱 TE 波态密度的计算<sup>[14]</sup>。但是到目前为止,针对二维光子晶体在短波长段 LED 上的应用,尚未有系统性的 PBG 结构计算。

在 p-GaN 上直接构建二维光子晶体结构是一种工艺相对成熟、行之有效、应用潜力较大的光子晶体 LED 结构。本文通过选取 p-GaN 上应用潜力较大的四种光子晶体结构,利用平面波展开法(PWE)对不同晶格常数下横电(TE)模式和横磁(TM)模式 PBG 在柱半径与晶格常数比和占空比即晶胞中空气所占比例(AFF)下的变化趋势进行对比研究,分析 PBG 变化规律,并为短波长光子晶体 LED 的设计应用提供有益参考。

## 2 理论分析及模型

PWE 方法<sup>[15,16]</sup>是一种发展成熟、应用广泛的光子晶体模拟计算方法。本文采用 PWE 方法对光子晶体结构进行计算,得出波矢相关允许的本征频率模式,通过转换得到无量纲频率模式,并分析得出光子禁带分布。

光子晶体在 LED 领域的应用主要是通过 PBG 的作用,使所设计的主发光波长恰好处于 PBG 之中,限制光子在二维方向的运动。选取平板 p-GaN,并在上面构建二维结构,晶胞结构如图 1 所示,晶格常数为  $a$ ,柱半径为  $r$ ,直径为  $d$ ,取  $p=r/a$ 。针对短波段 LED,考察不同晶格常数下 PBG 的变化趋势,本文选取  $a$  为 80~320 nm,间隔 20 nm。每种晶格常数下,分别针对介质柱取  $p$  范围为 0.20~0.42,空气柱取  $p$  范围为 0.40~0.50。之所以选取以上  $p$  值,首先从工艺角度出发, $p$  值较小情况下工艺难度较大不

易实现,其次介质柱状阵列 TE 模式在  $p$  值大于 0.42 时禁带消失,而空气柱阵列 TE 模式下  $p$  值小于 0.40 时不存在禁带。通常光子晶体 PBG 所限制波长段不小于晶格常数,即对于短波段 LED,为使其主波长处于 PBG 之中,需要晶格常数更小,工艺难度更高,而更难实现,也导致其应用范围受限。有些 PBG 会同时出现低频和高频模式,低频模式因其限制波长较长,对于短波段实际应用价值不大。所以,本文将主要针对短波长即高频 PBG 模式进行分析。

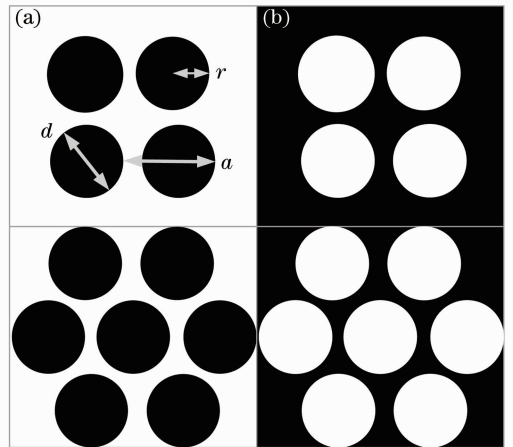


图 1 四种模拟计算晶胞示意图。(a)介质柱阵列;  
(b)空气柱阵列

Fig. 1 Schematic diagram of the simulation unit cell.

(a) Dielectric rods; (b) air holes

文献中的 PBG 分析多采用  $p$  与无量纲频率模式,若无特别说明,文中频率特指无量纲频率。为了能直观地体现工艺难度和 LED 设计波长选取范围并方便对比研究,本文还会采取  $p$  与波长形式进行分析。

## 3 数值结果分析

结构参量中有三个值,晶格常数  $a$ 、柱半径与晶格常数之比  $p$ 、折射率  $n$ 。采用控制变量法,轮流计算其中一个参量时,其他参量保持不变。首先,针对介质柱结构随机取  $p=0.26$ ,计算不同晶格常数下其 TE 模式和 TM 模式 PBG 中心频率及频率宽度分布,针对空气柱结构随机取  $p=0.45$ ,做出同上计算。

空心方块、实心方块、空心三角形和实心三角形依次代表正方空气柱、正方介质柱、三角空气柱和三角介质柱,文中将全用以上形状代替相应结构,不再加以说明。图 2 为相应结构在 TE、TM 模式下的能带图,图 2(a)和(e)对应于正方空气柱结构,图 2(b)和(f)对应于正方介质柱结构,图 2(c),(g)和图 2(d),(h)依次对应于三角空气柱和三角介质柱

结构。 $p$  值如上,在 TE、TM 模式下,空气柱结构都表现出单禁带模式,TE 模式下的介质柱结构表现出双禁带模式,且高频带比低频带狭窄。对不同晶

格常数下的结构进行验证,在折射率不变的情况下,能带频谱和晶格常数无关,符合 PBG 的一般规律。

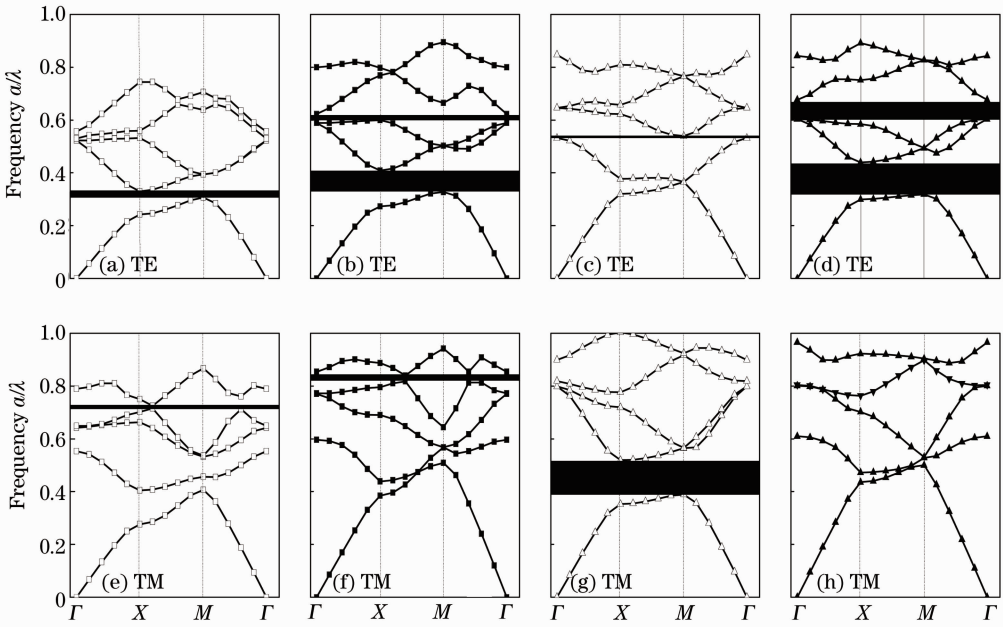


图 2 介质柱取  $p=0.26$  和空气柱结构取  $p=0.45$  时结构的能带图

Fig. 2 Band diagrams of structures with  $p=0.26$  for rods and  $p=0.45$  for air holes

折射率不变时,PBG 频谱分布和晶格常数无关,即任意一组晶格常数下的频谱分布都具有代表性。为了研究不同  $p$  值下 PBG 的总体分布和变化趋势,选取需要的高频模式。本文取  $a$  为 240 nm,在折射率不变的情况下,介质柱结构取  $p$  为 0.20~0.42,空气柱结构取  $p$  为 0.40~0.50,分别分析 TE、TM 模式下的 PBG 中心频率分布状况。如图 3(a)所示,TE 模式下,正方空气柱在  $p$  为 0.46~0.49 时存在高频和低频两条 PBG,在  $p$  为 0.42~0.46 时,只有正方空气柱的低频 PBG 存在,而在图 3(c)中,TE 模式下,三角空气柱只在  $p$  为 0.45~0.49 时存在一条高频 PBG。如图 3(e),(g)所示,TM 模式下,三角空气柱的 PBG 分布范围整体明显变大,在  $p$  为 0.40~0.49 时都有存在,但是明显呈低频变化,而正方空气柱高频段明显扩大范围,在  $p$  为 0.43~0.49 时存在,而且频率整体抬高。可以发现空气柱结构 PBG 中心频率随  $p$  值增大而增大,即与 AFF 成正比。图 3(b)中,TE 模式下,正方介质柱结构有两 PBG 带存在,且  $p$  为 0.26~0.40 时,两 PBG 并存, $p$  为 0.20~0.26 时只有低频模式 PBG 存在, $p$  值大于 0.40 时,PBG 消失。图 3(d)中三角介质柱结构有类似变化趋势, $p$  为 0.24~0.42 时两条 PBG 并存, $p < 0.24$  时,只有低频模式存在。并且在 TE 模式

下,两种结构在  $p > 0.42$  时都不存在 PBG,中心频率也较接近,且都随  $p$  值变大而下降,即与 AFF 成正比。图 3(h)显示,TM 模式下,三角介质柱结构频带分布范围明显缩小,只在  $p < 0.26$  时存在一条高频 PBG,图 3(f)中 TM 模式下,正方介质柱在  $p$  为 0.30~0.42 时存在高频和低频两条 PBG,且频率整体抬高, $p < 0.30$  时低频 PBG 消失。TM 模式下,两种介质柱结构 PBG 中心频率也随  $p$  增大而下降,与 AFF 成正比。通过数据分析得出,在折射率和晶格常数不变的情况下,介质柱和空气柱光子晶体结构 PBG 中心频率都与 AFF 成正比,即当空气组份变大时 PBG 中心频率增高。并且 TE 模式下,正方结构和三角结构高频段范围接近,大小差异较少,TM 模式下,正方介质柱阵列和三角孔状阵列的 PBG 范围较大, $p$  值适中。

针对光子晶体在短波长 LED 上的应用,感兴趣的主要是 PBG 中高频部分。所以选取双 PBG 结构中高频模式和单 PBG 结构中频带模式,计算其带宽,通过转换为波长形式,分别对禁带中心波长和带宽进行对比分析,以对二维光子晶体在提高短波长 LED 出光效率和制造偏振光短波段 LED 方面的应用提供有价值的参考。前文已经得出,在折射率不变的情况下,PBG 中心频率和频带宽分布与晶格

常数无关,而波长与频率呈与晶格常数相关的反比例关系,所以不同晶格常数下禁带波长、波宽数值不同,但其变化趋势完全相同。选取  $a=240\text{ nm}$ ,对介

质柱结构和空气柱结构模拟计算不同  $p$  情况下 PBG 中心波长及波宽,并分析 PBG 随 AFF 变化趋势。

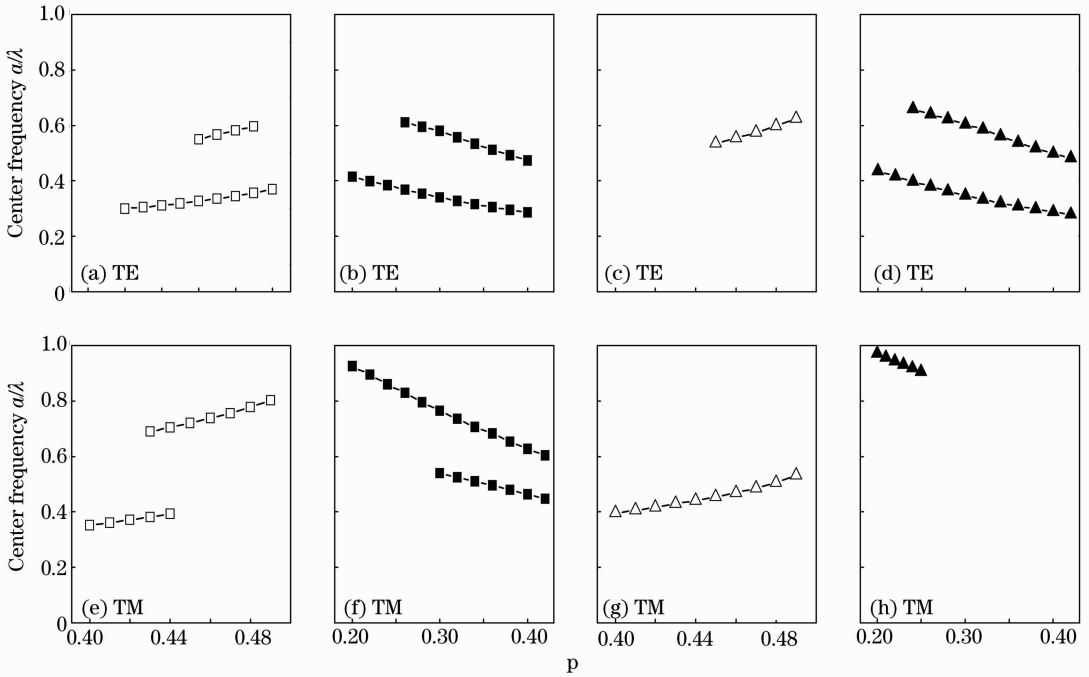


图 3 晶格常数  $a=240\text{ nm}$  时,不同  $p$  值结构的禁带中心频率

Fig. 3 PBG center frequency of structures with different  $p$  when  $a=240\text{ nm}$

如图 4(a)和(c)所示,正方空气柱和三角空气柱具有极接近的中心波长和波宽,都是在  $p>0.44$  时存在,但整体波宽太小,最大处只有介质柱结构最

大处的 1/6。从图 4(b),(d)可以看出,TE 模式下介质柱结构都有相对较低的中心波长和较高的波宽,同样的  $p$  值下三角介质柱结构略微占优,体现

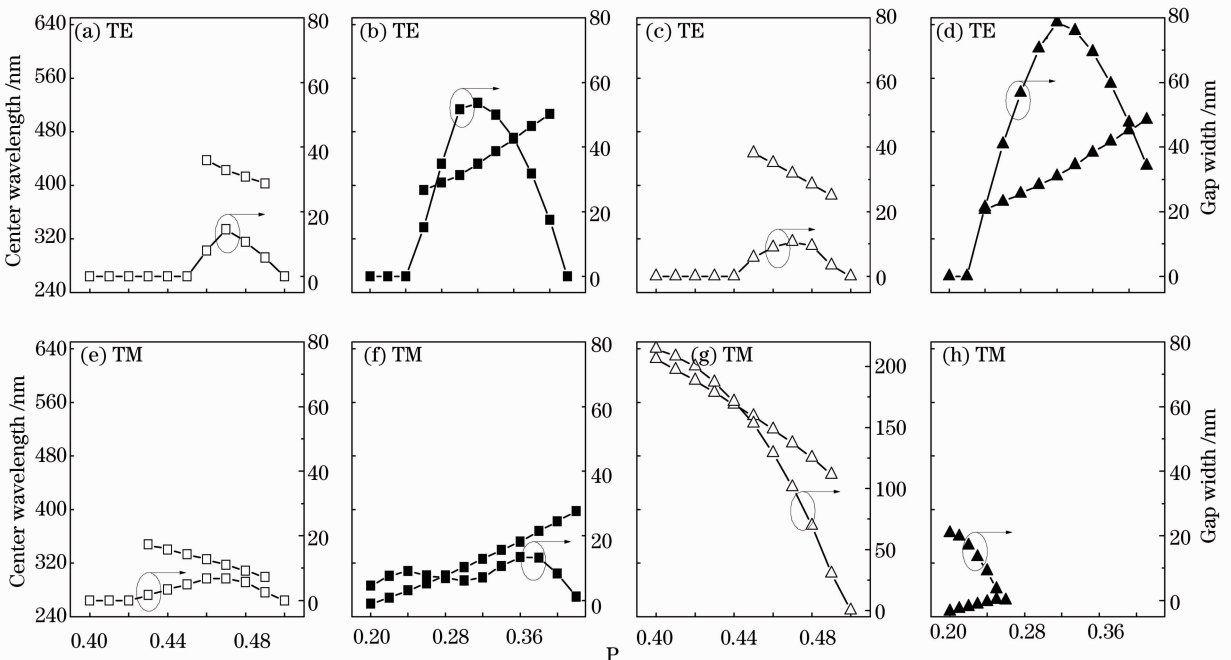


图 4 晶格常数为  $240\text{ nm}$  时,不同  $p$  值下结构的禁带特性

Fig. 4 PBG characteristics of structures with different  $p$  when  $a=240\text{ nm}$

出对 TE 波较强的限制作用。在图 4(e)中, TM 模式下, 正方孔高频禁带虽然中心波长相对较短, 但仍体现出较低波宽, 且  $p > 0.42$  时才存在, 所以其在短波段应用优势不大。而 TM 模式下, 三角孔 PBG 范围较广, 其分布范围远大于所选取的  $p$  值, 并且其 PBG 带宽较大, 体现出对 TM 波较强的限制优势, 但是其较大的波宽虽能够将其限制波长范围延伸到短波段, 相对介质柱结构其限制波段范围还是较长。如图 4(f), (h)所示, TM 模式下, 三角介质柱的 PBG 范围明显太小, 而正方介质柱结构具有相对合适的 PBG 波宽和较大的禁带范围。空气柱结构  $p$  值同 AFF 成正比, 介质柱结构  $p$  值同 AFF 成反比, 由图 4 可以得出 AFF 变化下的 PBG 的分布变化状况。PBG 中心波长随 AFF 增大而减小, 其波宽随 AFF 变大呈现出起伏趋势。

## 4 结 论

本文研究了 p-GaN 上应用潜力较大的 4 种光子晶体结构, 分别对它们在 TE 模式和 TM 模式不同  $p$  值及 AFF 下的 PBG 分布变化趋势进行研究。折射率一定时, 一定结构的光子晶体 PBG 频率分布和晶格常数无关, 只受  $p$  值和 AFF 影响, 符合 PBG 的一般规律, 并且 PBG 中心波长随 AFF 增大而增大, 波宽随 AFF 增大呈起伏规律变化。针对短波段 LED 上的应用, 选择晶格常数  $a$  为 80~320 nm, 并重点研究其高频段 PBG。通过分析发现, 在高频段 PBG 分布中, 相对于其他结构, 正方介质柱结构在 TE 模式和 TM 模式下都体现出禁带范围较广、限制波段较低、波宽适中的优势, 而三角介质柱结构和三角空气柱结构分别体现出单独对短波段 TE 模式、TM 模式的较强限制作用。正方介质柱结构在提高短波段 LED 出光效率方面具有更大潜能, 而三角介质柱结构和三角空气柱结构分别在制作短波段 TM 模式、TE 模式偏振光 LED 方面有较大潜力。

## 参 考 文 献

1 Eli Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state

- physics and electronics[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(20): 2059~2062
- 2 Sajeev John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **58**(23): 2486~2489
- 3 T. X. Lee, K. F. Gao, W. T. Chien *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
- 4 T. Fujii, Y. Gao, R. Sharma *et al.*. Increase in the extraction efficiency of GaN-based light-emitting diodes via surface roughening [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **84**(6): 855~857
- 5 J. J. Wierer, D. A. Steigerwald, M. R. Krames *et al.*. High-power AlGaInN flip-chip light emitting-diodes[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **78**(22): 3379~3381
- 6 S. J. Chang, C. F. Shen, W. S. Chen *et al.*. Nitride-based light emitting diodes with indium tin oxide electrode patterned by imprint lithography [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2007, **91**(1): 013504
- 7 G. M. Wu, Z. J. Cai, J. C. Wang *et al.*. Design and simulation in GaN based light emitting diodes using focused ion beam generated photonic crystals [J]. *Surface and Coating Technology*, 2009, **203**(17-18): 2674~2678
- 8 T. N. Oder, K. H. Kim, J. Y. Lin *et al.*. III-nitride blue and ultraviolet photonic crystal light emitting diodes [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **84**(4): 466~468
- 9 S. H. Kim, K. D. Lee, J. Y. Kim *et al.*. Fabrication of photonic crystal structures on light emitting diodes by nanoimprint lithography [J]. *Nanotechnology*, 2007, **18**(5): 055306
- 10 T. N. Oder, J. Shakyia, J. Y. Lin *et al.*. III-nitride photonic crystals[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, **83**(6): 1231~1233
- 11 Hyun Kyong Cho, Sun-Kyung Kim, Duk Kyu Bae *et al.*. Laser lift-off GaN thin-film photonic crystal GaN-based light-emitting diodes[J]. *IEEE Photon. Technol. Lett.*, 2008, **20**(24): 2096~2098
- 12 J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn *et al.*. *Photonic Crystals; Molding the Flow of Light*[M]. Princeton: Princeton University Press, 2008
- 13 Xuehua Wang, Rongzhou Wang, Benyuan Gu *et al.*. Decay distribution of spontaneous emission from an assembly of atoms in photonic crystals with pseudogaps[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2002, **88**(9): 093902
- 14 K. Busch, G. von Freymann, S. Linden *et al.*. Periodic nanostructures for photonics [J]. *Phys. Rep.*, 2007, **444**(3-6): 101~202
- 15 S. G. Johnson, J. D. Joannopoulos. Block-iterative frequency-domain methods for Maxwell's equations in a planewave basis[J]. *Opt. Express*, 2000, **8**(3): 173~190
- 16 S. Guo, S. Albin. Simple plane wave implementation for photonic crystal calculations[J]. *Opt. Express*, 2003, **11**(2): 167~175

栏目编辑: 韩 峰