

文章编号:1004-4213(2010)12-2200-4

# LED 梯度折射率封装结构的蒙特卡罗模拟\*

余仁勇, 金尚忠<sup>†</sup>, 梁培, 岑松原, 王乐

(中国计量学院 光学与电子科技学院, 杭州 310018)

**摘要:**针对封装胶中掺杂纳米颗粒以及采用梯度折射率的 LED 封装模式, 用蒙特卡罗方法模拟光在胶体中的传播, 分析散射系数对透光率的影响. 结果表明, 透光率随散射系数增大而减小. 对于固定的封装层数, 各层均采用最佳折射率值时, 透光率可以达到最大. 梯度折射率值逐渐减小的多层纳米掺杂封装结构, 透光率高于传统的封装模式, 能够提高 LED 的出光效率.

**关键词:**发光二极管(LED); 梯度折射率; 蒙特卡罗模拟; 纳米颗粒; 封装胶

中图分类号:TN312.8

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20103912.2200

## 0 引言

发光二极管(Light-Emitting Diode, LED)以其低功耗、长寿命和牢固的结构等优点, 得到了人们越来越多的关注<sup>[1]</sup>. 提高 LED 的出光效率, 一直是个热点问题<sup>[2]</sup>. 半导体芯片和空气之间的折射率存在较大的差值, 而对于传统的 LED 封装结构, 封装胶的折射率只能为某一特定的数值, 半导体芯片/封装胶/空气的折射率跨度依然较大, 导致出光的临界角小且菲涅尔反射损耗大. 因此, 材料间的折射率不匹配, 成为 LED 高出光效率的一个限制性因素<sup>[3]</sup>. 通过在环氧树脂材料中掺杂纳米颗粒(如: TiO<sub>2</sub> 或 ZrO<sub>2</sub>), 来获得高折射率的封装胶, 以及采用梯度折射率的 LED 多层封装结构, 可以更好地缩小半导体芯片/封装胶/空气的折射率差值, 降低菲涅尔反射损耗, 更有效地提高透光率, 从而提高 LED 的出光效率<sup>[4-9]</sup>.

为了分析梯度折射率的封装模式对透光率的影响, 需要统计出射到空气中的光子数目占 LED 芯片发射的光子总数的比例, 而以概率和统计理论方法为基础的蒙特卡罗方法是模拟光子统计特性的有效方法<sup>[10-12]</sup>. 运用蒙特卡罗方法建立随机过程, 对大数量光子进行模拟, 可以计算得到透光率.

本文针对封装胶中掺杂 TiO<sub>2</sub> 纳米颗粒以及采用梯度折射率的 LED 封装模式, 用蒙特卡罗方法模拟光在胶体中的传播, 分析封装胶的散射系数  $\mu_s$  对透光率的影响, 并得出对于固定的封装层数  $G$  值, 各层的最佳折射率.

## 1 LED 梯度折射率封装结构模型

### 1.1 LED 梯度折射率封装结构

研制具有高折射率、高透明度、优良耐紫外老化和热老化能力的封装材料, 对实现 LED 器件的高亮度具有十分重要的意义<sup>[4]</sup>. Mont 等<sup>[5]</sup>通过在环氧树脂材料( $n=1.53$ )中掺杂表面涂有活性剂的 TiO<sub>2</sub> 纳米颗粒, 研制出折射率值高达 1.68 以及透光率比传统环氧树脂材料高出 50% 的封装材料. Chau 等<sup>[6]</sup>以溶胶凝胶法合成得到折射率范围为 2.18~2.38 的 TiO<sub>2</sub> 纳米薄膜. 在环氧树脂材料( $n=1.53$ )中掺杂 TiO<sub>2</sub> 纳米颗粒( $n=2.70$ )之后, 材料的折射率与 TiO<sub>2</sub> 纳米颗粒的掺杂浓度成线性递增关系, 范围为 1.53~2.70<sup>[7]</sup>.

封装胶中掺杂 TiO<sub>2</sub> 纳米颗粒并采用如图 1 所示的梯度折射率 LED 封装模式, 透光率高于传统的 LED 封装结构, 能够达到 92%<sup>[5, 7-9]</sup>.

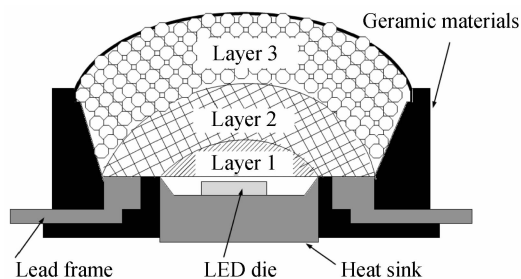


图 1 梯度折射率的封装结构

Fig.1 The schematic of the graded refractive index encapsulation structure

### 1.2 模型的建立

LED 芯片发射的光空间角度分布是广泛的, 光子入射到封装胶体后, 经过很小的传输距离, 将与纳米颗粒碰撞, 其向四周散射的方向是随机的. 如果光子为垂直入射状态, 光子与纳米颗粒碰撞后的

\* 国家高技术研究发展计划重点项目(2006AA03A130)和浙江省科技计划项目(2009C33104)资助

<sup>†</sup> Tel:0571-86914581

Email:jinsz@cjlu.edu.cn

收稿日期:2010-04-12

修回日期:2010-08-13

散射角度同样具有随机性和广泛性. 因此, 为了减少庞大的数据计算量, 本文设计了如图 2 所示的简化模型, 假定光仅为垂直状态, 近似再现 LED 芯片发射光的空间分布角度特性. 并且将封装胶视为无限宽的层状介质, 从而忽略从胶体侧面溢出的光子数量<sup>[13]</sup>.

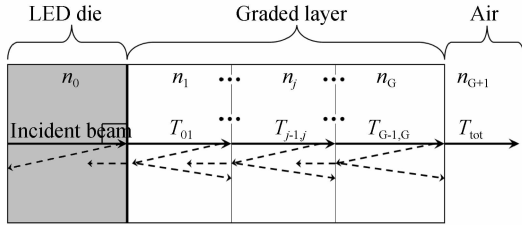


图 2 梯度折射率封装结构模型

Fig. 2 The model of graded refractive index encapsulation structure

蒙特卡罗方法的核心是对样品的均匀随机采样. 光子在掺杂  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒的封装胶中传输时, 会遇到纳米颗粒的散射, 界面的反射、折射. 这些都可以看作是光子在封装胶中传输时随机发生的事件. 这些随机模型的构造, 可以通过累计分布函数 (Cumulative Distribution Function, CDF) 求逆方法来实现, 通过对均匀分布随机序列的转换, 可以得到按  $p(x)$  分布的随机变量  $x$ ,  $x$  具有<sup>[14]</sup>

$$x = P_x^{-1}(\xi) \quad (1)$$

式中的  $\xi$  为 0 到 1 之间均匀分布的随机数.

根据式(1), 可以产生光子的随机步长  $\Delta s$

$$\Delta s = -(\ln \xi) / \mu_t \quad (2)$$

式中:  $\xi \in (0, 1)$ ;  $\mu_t$  为衰减系数,  $\mu_t = \mu_a + \mu_s$ ,  $\mu_a$  和  $\mu_s$  分别为  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒的吸收系数和散射系数.

因此, 光子从位置  $(x, y, z)$  沿方向向量  $r(l, m, n)$  传播  $\Delta s$  距离后的新位置  $(x', y', z')$  计算为

$$\begin{cases} x' = x + l \cdot \Delta s \\ y' = y + m \cdot \Delta s \\ z' = z + n \cdot \Delta s \end{cases} \quad (3)$$

光子在不同折射率的胶层界面有可能发生发射, 其概率由 Fresnel 反射系数  $R(\theta_i)$  决定, 用式(1)中均匀分布在 0 和 1 之间的随机数  $\xi$  来决定光子是反射还是透射. 如果  $\xi < R(\theta_i)$ , 则光子内部反射.  $R(\theta_i)$  满足<sup>[14]</sup>

$$R(\theta_i) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin^2(\theta_i - \theta_t)}{\sin^2(\theta_i + \theta_t)} + \frac{\tan^2(\theta_i - \theta_t)}{\tan^2(\theta_i + \theta_t)} \right] \quad (4)$$

式中,  $\theta_i$  和  $\theta_t$  分别为入射角和透射角.

光子在行进过程中, 遇到  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒, 将发生散射现象. 光子与  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒碰撞的概率, 受散射系数  $\mu_s$  影响. 光子散射的方向性可以用偏转角  $\theta$  和  $\psi$  方位角来表示.

根据式(1), 可以得到  $\theta$  和  $\psi$  的计算式<sup>[15]</sup>

$$\begin{cases} \cos \theta = \begin{cases} \frac{1}{2g} \left[ 1 + g^2 - \left( \frac{1 - g^2}{1 - g + 2g\xi} \right)^2 \right], & g \neq 0 \\ 2\xi - 1, & g = 0 \end{cases} \\ \psi = 2\pi\xi \end{cases} \quad (5)$$

式中,  $\theta \in (0, \pi)$ ,  $\psi \in (0, 2\pi)$ ,  $g$  为封装胶材料的异性因子.

散射系数  $\mu_s$  具有<sup>[16]</sup>

$$\mu_s = N \cdot \frac{8\pi r_{\text{nano}}^6}{3} \left( \frac{2\pi n_{\text{encap}}}{\lambda} \right)^4 \left( \frac{n_{\text{nano}}^2 - n_{\text{encap}}^2}{n_{\text{nano}}^2 + 2n_{\text{encap}}^2} \right)^4 \quad (6)$$

式中,  $N$  为纳米颗粒的掺杂浓度,  $r_{\text{nano}}$  为纳米颗粒的半径,  $\lambda$  为入射光的波长,  $n_{\text{nano}}$  和  $n_{\text{encap}}$  分别为纳米颗粒和封装胶的折射率值.

蒙特卡罗方法模拟光子在封装胶中的输运过程, 具体步骤概括为: 1) 根据入射条件确定起始追踪点; 2) 确定光子行进的方向和下一次碰撞的位置; 3) 确定在该位置光子的吸收和散射部分; 4) 返回第二步. 如此循环计算, 直到光子权重小于某一设定值, 之后对其进行轮盘赌, 判断其生存机会. 或者当光子逃逸出封装胶最外层时, 结束对该光子的跟踪. 然后返回第一步记录另一光子, 直到所设定的光子数追踪完毕. 最后, 记录逃逸出封装胶最外层的总光子数.

## 2 结果与分析

基于前文所述的原理, 本文模拟了光在掺杂  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒以及具有梯度折射率结构的层状环氧树脂材料中的传播. 由于  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒在可见光波段的吸收几乎为零, 即吸收系数  $\mu_a$  为 0<sup>[17-18]</sup>. 同时假定光子在材料中散射是各项同性的, 即各项异性因子  $g = 0$ ; GaN 芯片的折射率值  $n_0 = 2.50$ ; 模拟的光子包数量为 100 000.

在折射率为 1.53 的胶中, 体掺杂浓度约为 25% 的  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒时, 掺杂胶的折射率 1.98<sup>[6]</sup>. 对于  $G=3$  的三层封装结构, 封装胶的折射率  $n_1$ 、 $n_2$ 、 $n_3$  随机取值依次为 1.98、1.53、1.41. 对于掺杂后的材料, 其散射系数由  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒的粒径和体掺杂浓度决定, 散射系数  $\mu_s$  分别设置为 5、10、20、30、50、80、120、150、181、230、250、300、350  $\text{cm}^{-1}$ <sup>[4]</sup>. 得到拟合后的透光率与散射系数关系, 如图 3. 透光率随散射系数  $\mu_s$  的增大而减小; 散射系数  $\mu_s$  越小, 即光子在封装胶中散射的概率越小, 被俘获于封装中的光子数也将越少, 胶的透光率越大; 掺杂粒径约为 10 nm 时,  $\mu_s$  可以达到 5  $\text{cm}^{-1}$ <sup>[4]</sup>, 三层封装结构的胶透光率能达到 92%.

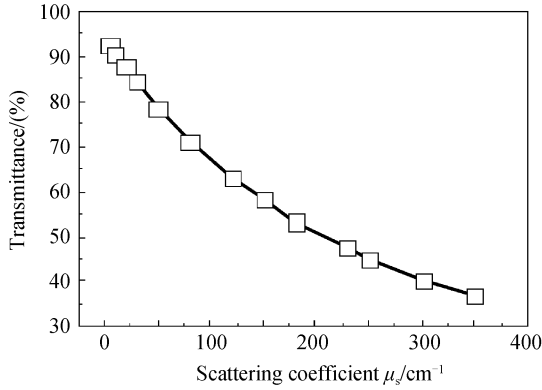


图3 透光率与散射系数关系图

Fig. 3 The relationship of transmittance with scattering coefficient

用向量  $C(C=[x_1 \ x_2 \ x_3])$  来表示 3 层纳米掺杂封装, 它表示紧邻半导体的第 1, 2, 3 层的折射率值分别为  $x_1, x_2, x_3$ . 对于 3 层封装结构, 假定散射系数  $\mu_s$  均相同, 随机改变 3 层材料的折射率值, 通过模拟可以得出最后的透光率  $T_{\text{tot}}$ , 模拟的数值结果如表 1.

表 1 不同折射率组合的 3 层封装结构中的透光率

Table 1 The transmittance of encapsulants with three layers for different vectors of refractive values

No.	Vector	Transmittance/(%)
$C_1$	[2.07 1.71 1.41]	92.8
$C_2$	[2.00 1.71 1.41]	92.6
$C_3$	[2.07 1.65 1.41]	92.6
$C_4$	[1.99 1.50 1.41]	92.2
$C_5$	[1.90 1.48 1.41]	92.1
$C_6$	[1.85 1.43 1.41]	91.8
$C_7$	[1.85 1.43 1.41]	91.7
$C_8$	[1.72 1.43 1.41]	91.5
$C\text{-flip}_1$	[1.41 1.71 2.07]	79.2
$C\text{-flip}_2$	[1.41 1.71 2.00]	80.2
$C\text{-flip}_3$	[1.41 1.65 2.07]	79.3
$C\text{-flip}_4$	[1.41 1.50 1.99]	80.1
$C\text{-flip}_5$	[1.41 1.48 1.90]	81.4
$C\text{-flip}_6$	[1.41 1.43 1.85]	82.2
$C\text{-flip}_7$	[1.41 1.43 1.85]	83.0
$C\text{-flip}_8$	[1.41 1.43 1.72]	84.2

向量  $C_1$  至  $C_8$  所表示的梯度折射率值是逐渐减小的, 而  $C\text{-flip}_1$  至  $C\text{-flip}_8$  所表示的梯度折射率值是逐渐增大的. 从表 1 可以看出, 向量  $C_1$  至  $C_8$  的透光率值, 均大于向量  $C\text{-flip}_1$  至  $C\text{-flip}_8$  的透光率值, 采用梯度折射率值逐渐减小的封装结构, 能获得更大的透光率; 基于向量  $C_1$  的最佳折射率分布, 能使透光率值最大;  $C_2$  和  $C_3$  均趋近于  $C_1$ , 其透光率也趋近于  $C_1$  的透光率.

光在层状封装胶中传播时, 将发生多次反射和折射. 对于  $G$  层封装结构的透光率, 可表示为<sup>[4]</sup>

$$T_{\text{tot}} = \frac{n_0 n_1}{(n_0 + n_1)^2} \prod_{j=2}^{G+1} \frac{4 \frac{n_{j-1} n_j}{(n_{j-1} + n_j)^2}}{\left[ 1 - \frac{(n_{j-1} - n_{j-2})^2 (n_{j-1} - n_j)^2}{(n_{j-1} + n_{j-2})^2 (n_{j-1} + n_j)^2} \right]} \quad (7)$$

式中,  $n_0$  和  $n_{G+1}$  分别为半导体芯片和空气的折射率值,  $n_1, n_2, \dots, n_G$  依次为紧邻半导体芯片的第 1, 2,  $\dots, G$  层的折射率值.

对于封装胶中掺杂  $\text{TiO}_2$  纳米颗粒以及采用梯度折射率的封装模式, 在式(7)中, 本文结合实际情况, 给定  $n_m (m=1, 2, \dots, G)$  的范围为 [1.41–2.70]<sup>[6]</sup>, 运用 Matlab 求解有约束最优化问题, 可以得到各  $G$  值所对应的最佳折射率值. 例如,  $G=3$  所对应的最佳折射率值  $n_1, n_2, n_3$  依次为 2.07、1.71、1.41.

由此可见, 基于向量  $C_1 [2.07 \ 1.71 \ 1.41]$  的最佳折射率分布的模拟分析结果与运用 Matlab 的求解值是相吻合的. 基于向量  $C_1$  的最佳折射率分布, 能使透光率值最大.

### 3 结论

本文用蒙特卡罗方法模拟了光在 LED 封装胶体中的传播. 结果表明: 对于梯度折射率的 LED 封装结构, 透光率随散射系数增大而减小; 采用梯度折射率值逐渐减小的封装结构, 能够获得更大的透光率; 对于特定的  $G$  层封装结构, 各层均采取最佳折射率搭配时, 能使透光率最大. 多层纳米掺杂封装结构, 透光率高于传统的封装模式.

#### 参考文献

- [1] ZHAO Hua-long, LIANG Zhi-yi, SHI Xing-chun, *et al.* The design of LED using in optical projector[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2007, **36**(2): 244-246.  
赵华龙, 梁志毅, 石兴春, 等. 利用 LED 的投影系统光源设计[J]. *光子学报*, 2007, **36**(2): 244-246.
- [2] NARENDRAN N, GU Y, FREYSSINIER-NOVA J P, *et al.* Extracting phosphor-scattered photons to improve white LED efficiency[J]. *Phys Status Solidi A*, 2005, **202**(6): R60-R62.
- [3] RIEGLER B, THOMAIER R. Index matching silicone for optoelectronic applications[C]. *SPIE*, 2007, **6665**: 1-8.
- [4] LIU J G, UEDA M. High refractive index polymers: fundamental research and practical applications[J]. *J Mater Chem*, 2009, **19**(47): 8907-8919.
- [5] MONT F W, KIM J K, SCHUBERT M F, *et al.* High refractive index nanoparticle-loaded encapsulants for light-emitting diodes[C]. *SPIE*, 2007, **6486**: 1-8.
- [6] CHAU J L H, LIN Y M, LI A K, *et al.* Transparent high refractive index nanocomposite thin films[J]. *Mater Lett*, 2007, **61**(14-15): 2908-2910.
- [7] MONT F W, KIM J K, SCHUBERT M F, *et al.* High-refractive-index  $\text{TiO}_2$ -nanoparticle-loaded encapsulants for light-emitting diodes[J]. *J Appl Phys*, 2008, **103**(8): 3120-3125.

- [8] LEE B K, GOH K S, CHIN Y L. Light emitting diode with gradient index layering; US, 6717362[P]. 2004-04-06.
- [9] LESTER S D, MILLER J N, ROITMAN D B. High refractive index package material and a light emitting device encapsulated with such material; US, 5777433[P]. 1998-07-07.
- [10] YAN Jun, YU Ying. LED's optical encapsulation structure design based on monte carlo simulation method[J]. *Chinese Journal of Luminescence*, 2004, **25**(001): 90-94.  
颜峻, 于映. 基于蒙特卡罗模拟方法的光源用 LED 封装光学结构设计[J]. *发光学报*, 2004, **25**(001): 90-94.
- [11] SHEN TU Wei-jin, HU Fei, HAN Yan-jun. Study on light extraction efficiency of GaN-based Light-emitting diode chips [J]. *Journal of Optoelectronics · Laser* 2005, **16**(004): 385-389.  
申屠伟进, 胡飞, 韩彦军, 等. GaN 基发光二极管芯片光提取效率的研究[J]. *光电子·激光*, 2005, **16**(004): 385-389.
- [12] LI Wei, HE Yong-hong, MA Hu. Polarization gating imaging in turbid medium : monte carlo simulation[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2008, **37**(003): 518-522.  
李伟, 何永红, 马辉. 偏振门用于对散射介质成像的蒙特卡罗模拟研究[J]. *光子学报*, 2008, **37**(003): 518-522.
- [13] KANG Dun-yan. Model development and optimal design of phosphor-type white-light-emitting diodes [D]. Taiwan: National Taiwan University, 2006: 43-54.  
康敦彦. 荧光粉型白光发光二极管之模型建构与最佳设计 [D]. 台湾: 国立台湾大学, 2006: 43-54.
- [14] LEI Gui-yuan. Some research on monte carlo and quasi-monte carlo[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2003: 14-15.  
雷桂媛. 关于蒙特卡罗及拟蒙特卡罗方法的若干研究[D]. 杭州, 浙江大学, 2003: 14-15.
- [15] PRAHL S, KEIJZER M, JACQUES S, *et al.* A monte carlo model of light propagation in tissue[C]. *SPIE*, 1989, **5**: 102-111.
- [16] BOHREN C F, HUFFMAN D R. Absorption and scattering of light by small particles[M]. New York: John Wiley & Sons, 1983: 99-136.
- [17] KIM S H, KIM J Y, PARK S H, *et al.* New architectures for high performance polymer light-emitting diodes introducing a solution-processed titanium oxide layer [C]. *SPIE*, 2007, **6486**: 64860D-1~64860D-8.
- [18] CABRERA M I, ALFANO O M, CASSANO A E. Absorption and scattering coefficients of titanium dioxide particulate suspensions in water[J]. *J Phys Chem*, 1996, **100**(51): 20043-20050.

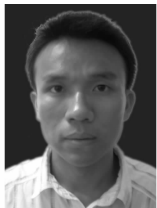
## Monte Carlo Simulation on LEDs Graded-Refractive-Index-Encapsulation

YU Ren-yong, JIN Shang-zhong, LIANG Pei, CEN Song-yuan, WANG Le

(*Institute of Optical and Electronic Technology, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China*)

**Abstract:** Light propagation in nanoparticle-loaded encapsulants is simulated based on the method of Monte Carlo, referring to the multilayer graded refractive index structure for LED encapsulants. And the influence of scattering coefficient on transmittance is analyzed. The results show that the transmittance decreases with scattering coefficient. For a given number of layers, the encapsulants will yield maximum transmittance if the refractive index value of each layer is optimized. The nanoparticle-loaded encapsulant consists of multiple layers with refractive-index values that gradually decrease, transmittance will be higher than in traditional non-graded encapsulants, and will improve light extraction efficiency of LED.

**Key words:** Light-Emitting Diode (LED); Graded refractive index; Monte Carlo simulation; Nanoparticle; Encapsulant



**YU Ren-yong** was born in 1985. He received his B. S. Degree from Tianjin Polytechnic University. Now he is a graduate student at Institute of Optical and Electronic Technology of China Jiliang University. His research interests focus on LEDs package and optical design.