

文章编号:1004-4213(2010)07-1208-5

# 基于双光栅结构下特征参量与 GaN 基 LED 光提取效率的动态关系\*

王亚伟<sup>1a</sup>, 刘仁杰<sup>1b</sup>, 金骥<sup>2</sup>, 刘明礼<sup>1b</sup>

(1 江苏大学 a. 理学院; b. 机械工程学院, 江苏 镇江 212013)

(2 中国计量学院, 杭州 310018)

**摘要:**为解决光子在半导体和空气界面处的全反射导致的 GaN 基发光二极管外量子效率低下的问题, 基于双光栅 GaN 基发光二极管芯片模型的基本构成, 利用蒙特卡罗算法及波动方程理论进行模拟, 分析了光子的主要损耗对出光效率的影响. 通过数值计算模拟, 计算了不同光栅槽深、周期及吸收系数对发光二极管光提取效率的动态影响, 结果表明: 光提取效率曲线随反射光栅槽深的增大呈余弦周期性变化, 与光栅衍射效率与槽深之间的关系是一致的; 光提取效率在光栅间距为介质中光波长附近时达到最大, 随着周期的增大或减小而减小; 双光栅 GaN 基发光二极管受 GaN 吸收系数影响比传统 GaN 基发光二极管明显, 吸收系数越小, 光提取效率越高. 透射光栅槽深为 350 nm, 周期为 300 nm, 反射光栅槽深为 230 nm, 周期为 250 nm, GaN 吸收系数为 0 时能获得最大光提取效率为 67%. 而传统平板型 GaN 基发光二极管, 模拟得到的光提取效率只有 18.5%, 添加双光栅结构后的 GaN 基发光二极管, 可以提高光提取效率 3 倍以上. 结合提高晶体质量, 降低 GaN 吸收系数能更有效提高光提取效率.

**关键词:** 光学; 光提取效率; 蒙特卡罗; 发光二极管; 提高; 动态关系

**中图分类号:** O436.1

**文献标识码:** A

**doi:** 10.3788/gzxb20103907.1208

## 0 引言

在世界能源普遍缺乏和绿色环保观念日益增强的今天, 发光二极管 (Lighting Emitting Diode, LED) 成为最受关注的光源之一. 其中, GaN 基 LED 作为蓝光照明材料, 其优势尤其明显: GaN 基 LED 不但可以作为白光 LED 的激发光源, 而且可以作为液晶显示的背光源、大幅广告和夜景光源等, 在交通指示、户外照明及全色显示等领域也有着广泛的应用<sup>[1]</sup>. 但是, 目前 GaN 基 LED 亮度还不能完全满足用户需要, 其主要原因之一是器件的内量子效率和光提取效率不高, 导致外量子效率较低. 内量子效率不高是由于 GaN 材料与衬底的晶格失配和热失配, 外延层结构及散热引起的<sup>[2-3]</sup>, 光提取效率低主要是由于 LED 材料与外界材料的折射率相差很大, 存在界面全反射作用. 有源层发射的大部分光在界面被反射回来, 形成波导光被困在器件内部, 经过多次反射最终被半导体吸收, 转化为热能. 这不但造成了能

量的大量损耗, 而且由于 LED 经常工作在高温状态, 也使得 LED 的使用寿命缩短.

目前针对提高芯片光提取效率的研究已引起了不少国内外专家的关注, 也取得了一些进展, 其中主要有: 改变芯片的几何外形, 减少光在芯片内部的传播路程, 降低光的吸收损耗, 如采用倒金字塔结构<sup>[4]</sup>; 采用表面粗糙和加反射镜的方法<sup>[5-7]</sup>, 使光在粗糙的半导体和空气 (或其他介质) 界面发生散射, 增加其透射的机会; 制作二维光子晶体结构采用的方法主要有三种: 一是在 p 型 GaN 材料<sup>[8-9]</sup> 或铟锡氧化层 (Indium-Tin-Oxide, ITO)<sup>[10]</sup> 表面制作二维结构来提高器件的光提取效率; 二是在蓝宝石衬底的底面制作类似透镜阵列的结构<sup>[11]</sup> 来提高 LED 底面的光提取效率; 三是在蓝宝石衬底制作二维结构 (Patterned Sapphire Substrates, PSS), 然后生长 GaN 材料制作成 LED 器件. 其中, 在 LED 中引入双光栅结构的方法可以有效地增强光提取效率, 即除了在 ITO 层感应耦合等离子体 (Inductively Coupled Plasma, ICP) 刻蚀一个透射光栅, 另外在 GaN 层的下表面刻蚀反射光栅, 由于反射光栅减小了受限光的入射角, 因此可有效地提取受限光, 同时也可以降低 LED 芯片的结温. 然而与传统 GaN 基

\*江苏省高校重大基金和江苏省自然科学基金 (BK2008230) 资助

Tel: 0511-88791466

Email: jszjwyw@yahoo.com

收稿日期: 2009-10-28

修回日期: 2009-11-17

LED 相比,双光栅 GaN 基 LED 的工艺较为复杂,没有系统的优化.为此本文对双光栅 GaN 基 LED 的光栅槽深、光栅周期及 GaN 吸收系数进行了优化,模拟并分析了这些参量对光提取效率的影响,得出了光提取效率随反射光栅槽深变大呈周期性余弦变化等结论.

## 1 GaN 基 LED 的一般结构及特征

传统 GaN 基 LED 结构由 ITO 电极层,透明金属扩展层,外延层(p-GaN,有源层,n-GaN),蓝宝石衬底及金属反射层组成,基本平面尺寸为  $350\ \mu\text{m} \times 350\ \mu\text{m}$ ,ITO 电极层厚  $0.4\ \mu\text{m}$ ,p 型层厚度为  $0.2\ \mu\text{m}$ ,n 型层为  $3\ \mu\text{m}$ ,蓝宝石为  $80\ \mu\text{m}$ ,具体结构如图 1.由于 p 型 GaN 导电性较差,而且很薄,所以电流均集中在 p 型电极下.为了使有源层得到均匀的电流分布,透明金属扩展层是必要的<sup>[12]</sup>.

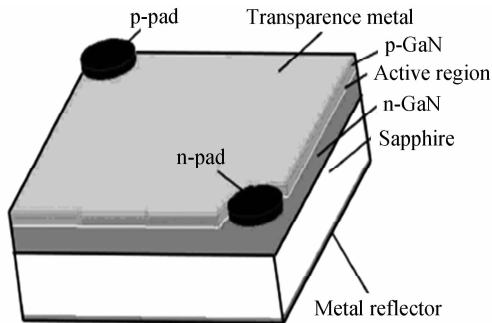


图 1 传统 GaN 基 LED 结构  
Fig. 1 Structure of conventional GaN-based LED chip

## 2 双光栅 GaN 基 LED 物理模型

双光栅 GaN 基 LED<sup>[13]</sup>由 ITO 电极层,外延层(p-GaN,有源层,n-GaN),蓝宝石衬底及金属反射层组成,一般平面尺寸为  $350\ \mu\text{m} \times 350\ \mu\text{m}$ ,ITO 电极层厚  $0.4\ \mu\text{m}$ ,p 型层厚度为  $0.2\ \mu\text{m}$ ,n 型层为  $3\ \mu\text{m}$ ,在 ITO 电极上刻蚀透射光栅,在 GaN 层的下表面刻蚀(如结合激光剥离技术,Laser Lift-Off Technique)第二个光栅,然后粘合在蓝宝石衬底上.由于提取效率的提高主要取决于光栅对反射光的多次衍射<sup>[14]</sup>,因此设计时在 GaN 层和蓝宝石衬底之间添加了金属层作为反射镜,粘合前,在衬底上沉积金属反射层,用反射光栅表示第二个光栅和金属层的结合体.具体结构如图 2.

基于上述模型,对双光栅 GaN 基 LED 模型进行建模,各层介质均由平面方程给出,用一个上下发光面代替有源层,光子均匀分布在有源层,初始位置

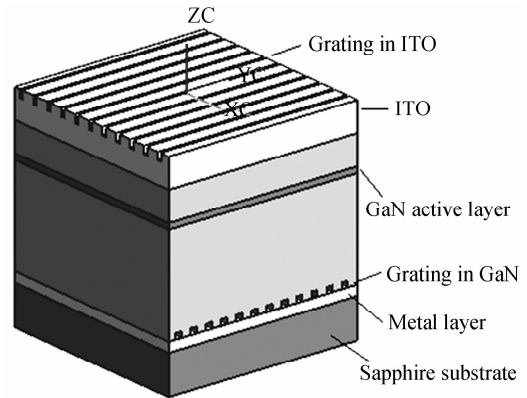


图 2 双光栅 GaN 基 LED 结构  
Fig. 2 Structure of GaN-based LED with double gratings chip

定为  $(x_i, y_i, z_i)$ ,方向矢量  $D_0$  的三个分量为<sup>[15]</sup>

$$\begin{cases} D_x = \sqrt{1-\zeta_1^2} \sin 2\pi\zeta_2 \\ D_y = \sqrt{1-\zeta_1^2} \cos 2\pi\zeta_2 \\ D_z = \zeta_1 \end{cases} \quad (1)$$

式中  $\zeta_1$  和  $\zeta_2$  是  $[0,1]$  内均匀产生的随机数.

利用蒙特卡洛方法进行光线追迹就可以得到光子与各个界面的作用点,直到能量降为初始值  $0.01\%$  时光子湮没.采用几何光学和波动光学两种方法处理光子<sup>[16]</sup>,对于尺寸较光波长大的介质和界面作用时,采用几何光学处理.光子传播时,光强随传播距离的衰减公式为

$$I' = I_0 e^{-\alpha l} \quad (2)$$

式中  $\alpha$  为材料吸收系数, $l$  为光子通过的直线距离.由菲涅耳公式得到光子的反射几率

$$R_F = \frac{1}{2} \left[ \frac{\sin^2(\theta_i - \theta_r)}{\sin^2(\theta_i + \theta_r)} + \frac{\tan^2(\theta_i - \theta_r)}{\tan^2(\theta_i + \theta_r)} \right] \quad (3)$$

而对光栅表面则采用波动光学处理.将光线转换为振幅和相位,衍射后再转换为强度,最后记录逃逸出来的光强.

矩形光栅衍射效率的一般表达式为<sup>[17]</sup>

$$\begin{cases} \eta_0 = 1 - 2\rho(1-\rho)(1 - \cos \Delta\varphi) \\ \eta_{m>0} = \frac{1}{m^2 \pi^2} (1 - \cos 2m\pi\rho)(1 - \cos \Delta\varphi) \end{cases} \quad (4)$$

式中  $\rho$  为占空比, $\Delta\varphi$  为位相差, $m$  为衍射级数.

## 3 模拟实验结果及分析

传统的 GaN 基 LED 由于全反射,大部分辐射光被限制在有源层内,双光栅 GaN 基 LED,可改变反射光的方向,提高光提取效率(文献[13]中的理论提取效率可达到  $48.5\%$ ),然而光栅参量及 GaN 光吸收系数对于光提取效率的效果影响较大.针对这

些问题,模拟未封装的 GaN 基 LED,发光波长为 445 nm,GaN 的折射率取 2.4,ITO 电极层的折射率为 2;考虑到有源层很薄和被有源层吸收的光子有部分会发生二次辐射,GaN 统一取非本征吸收系数  $\alpha$  为 10/mm;空气折射率取 1.0. 忽略各向差异,金属反射镜的反射率取 90%,光子在有源层均匀产生,初始方向随机,总功率取 2 W.

### 3.1 反射光栅槽深对光提取效率的影响

反射光栅槽深  $h_r$  取值范围为 50~1 000 nm,透射光栅槽深  $h_t$  取值范围为 50~400 nm,得到的光提取效率与光栅的槽深关系如图 3. 模拟发现光提取效率曲线呈余弦周期性变化,由式(4)可知这与光栅衍射率的变化是一致的. 当占空比为 0.5 时,光栅

零级和正负一级衍射率皆为余弦函数. 衍射率之和为

$$\eta = 0.5 + \frac{4}{\pi^2} + (0.5 - \frac{4}{\pi^2}) \cos \Delta\varphi \quad (5)$$

### 3.2 光栅周期对光提取效率的影响

改变光栅周期的大小,反射光栅和透射光栅周期的取值范围为 100~700 nm,得到光提取效率与周期关系如图 4. 模拟发现,不同周期光提取效率最大值出现在 250 nm 和 300 nm 两点附近. 当周期继续增大时,光提取效率反而略有下降. 这是因为光栅衍射时,最理想的尺寸应该与光在 GaN 或 ITO 中的波长相比拟. 当周期远小于光波长时,不利于光的衍射,将降低光栅改变光方向的效果;当周期远大于光波长时,光栅平面部分太大,将有更多光发生全反射,同样不利于光的出射. 再更换两个光栅的其他参量时,光提取效率最大值还是在 250 nm 和 300 nm 两点附近.

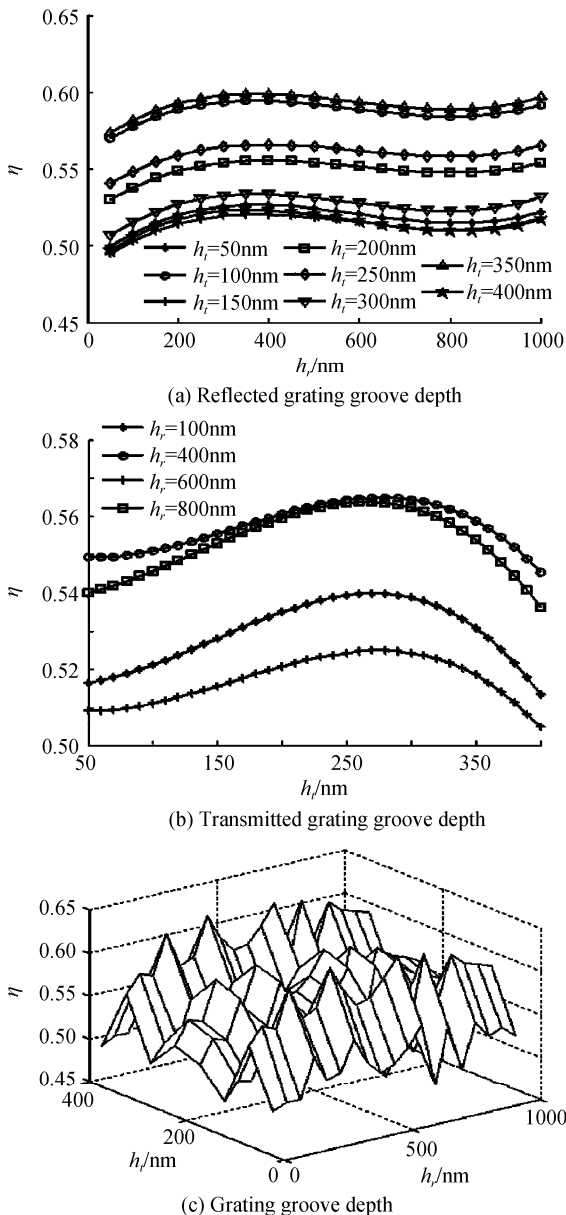


图 3 光栅参量与光提取效率之间的关系  
Fig. 3 Relationship of grating and light extraction efficiency

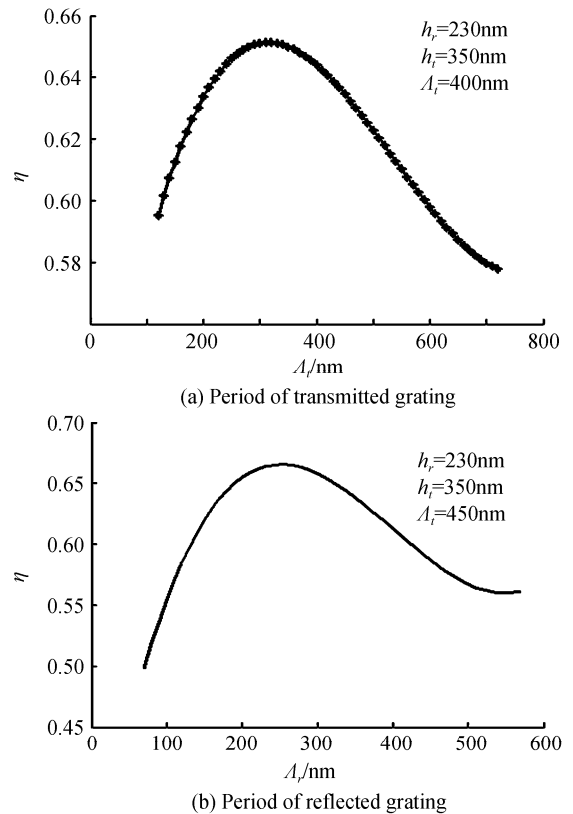


图 4 光栅周期与光提取效率之间的关系  
Fig. 4 Relationship of grating period and light extraction efficiency

### 3.3 GaN 吸收系数对光提取效率的影响

模拟时,吸收系数  $\alpha$  的取值范围为 0~200/cm,双光栅 GaN 基 LED 和传统 GaN 基 LED 出光效率与 GaN 吸收系数的关系如图 5. 从图中可以看到,传统 GaN 基 LED 和加上双光栅后的 LED 的光提

取效率均随  $\alpha$  增大而线性减小,而传统 GaN 基 LED 光提取效率随吸收系数增大而减小的幅度要较双光栅结构的小,这是因为传统 GaN 基 LED 芯片,无法使光的方向随机变化,所以一部分光无论经过多少次反射,入射角始终大于全反射角,最终被完全吸收,因此这部分光与吸收系数无关,而光子双光栅 LED 中传播方向不断改变,只要不被吸收掉,经过多次的反射总能逃逸出去,因此吸收系数的降低能更大程度上提高双光栅 LED 的光提取效率,从而进一步提高晶体质量,降低 GaN 吸收系数,对研制更高效率的 LED 也有相当重要的意义.当透射光栅槽深取 350 nm,周期取 300 nm,反射光栅槽深取 230 nm,周期取 250 nm 时,由图 5 可知,在 GaN 吸收系数  $\alpha$  降到  $0/\text{cm}$  的情况下,最高光提取效率可达到 67%.

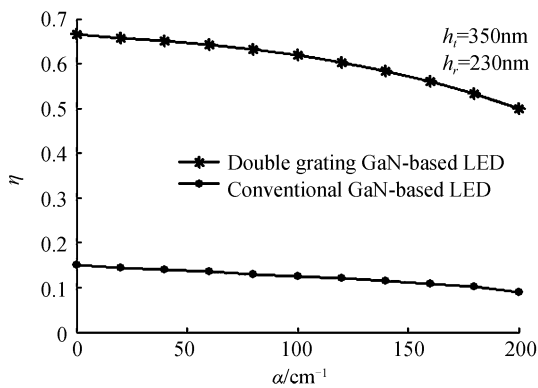


图 5 GaN 吸收系数与光提取效率之间的关系  
Fig. 5 Relationship of absorption coefficient of GaN and light extraction efficiency

## 4 结论

针对光子在半导体和空气界面处的全反射导致 GaN 基 LED 的外量子效率低下的问题,根据双光栅芯片建立 LED 模型,利用蒙特卡罗算法和波动光学理论进行模拟,分析了光子的主要损耗对光提取效率的影响.通过数值计算模拟,计算了不同的光栅槽深、周期及吸收系数对 LED 光提取效率的动态影响,从理论上得到了最佳透射光栅槽深和周期、反射光栅槽深和周期的设计参量,此时光栅结构可以提高光提取效率 3 倍以上,由此实现对光栅槽深,光栅周期及 GaN 光吸收系数进行优化设计的目的.

### 参考文献

[1] LIN Han, LIU Shou, ZHANG Xiang-su, *et al.* Enhanced external quantum efficiency of light emitting diodes by fabricating two-dimensional photonic crystal sapphire substrate with holographic technique[J]. *Acta Physics Sinica*, 2009, **58**(2): 959-963.  
林瀚,刘守,张向苏,等.全息技术制作二维光子晶体蓝宝石衬底提高发光二极管外量子效率[J]. *物理学报*, 2009, **58**(2): 959-963.  
[2] LEE T X, LIN C Y, MA S H, *et al.* Analysis of position-

dependent light extraction of GaN-based LEDs[J]. *Opt Exp*, 2005, **13**(11): 4175-4179.  
[3] CHENG Hai-ying, FANG Wen-qing, MO Chun-lan, *et al.* Effect of  $\delta$ -doping on performance of GaN blue LED epitaxial films on Si substrates[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(8): 1269-1273.  
程海英,方文卿,莫春兰,等. $\delta$ 掺杂对 Si 衬底 GaN 蓝光 LED 外延膜性能的影响研究[J]. *光学学报*, 2006, **26**(8): 1269-1273.  
[4] KRAMES M R, OCHIAI-HOLCOMB M, HÖLER G E, *et al.* High-power truncated-inverted-pyramid  $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}/\text{GaP}$  light-emitting diodes exhibiting  $> 50\%$  external quantum efficiency[J]. *Appl Phys Lett*, 1999, **75**(16): 2365-2367.  
[5] ZHENG Qing-hong, LIU Bao-lin, ZHANG Bao-ping, *et al.* Simulation of the enhancement of photon extraction efficiency of GaN-Based LED via surface roughening [J]. *Chinese Journal of Electron Devices*, 2008, **31**(4): 1077-1080.  
郑清洪,刘宝林,张保平,等.表面粗化提高 GaN 基 LED 光提取效率的模拟[J]. *电子器件*, 2008, **31**(4): 1077-1080.  
[6] PENG W C, WU Y S, *et al.* Enhanced performance of an InGaN - GaN light-emitting diode by roughening the undoped-GaN surface and applying a mirror coating to the sapphire substrate[J]. *Appl Phys Lett*, 2006, **88**: 1817.  
[7] SU Li-wei, YOU Da, CHENG Hai-yin, *et al.* Characterization of High-Power GaN-Based green LED on Si substrate[J]. *Acta Optica Sinica*, 2009, **29**(4): 1066-1069.  
苏丽伟,游达,程海英,等. Si 衬底功率型 GaN 基绿光 LED 性能[J]. *光学学报*, 2009, **29**(4): 1066-1069.  
[8] BIMBERG H Y, RYU Y H, LEE R L, *et al.* Over 30-fold enhancement of light extraction from free-standing photonic crystal slabs with InGaAs quantum dots at low temperature [J]. *Appl Phys Lett*, 2001, **79**(22): 3573-3575.  
[9] LI Y, ZHENG R S, FENG Y C, *et al.* Effects of the microstructure slab with pillars on light extraction of GaN light-emitting diode[J]. *Chin Phys*, 2006, **15**(4): 702-707.  
[10] LIN H, ZHANG X S, LIU S, REN X C, *et al.* Enhancement of external quantum efficiency of LEDs by fabricating photonic crystal in ITO p-contact layer [C]. *SPIE*, 2008, **6832**: 683203.  
[11] NAKARMI M L, KIM K H, KHIZAR M, *et al.* Electrical and optical properties of Mg-doped Al [sub 0.7] Ga [sub 0.3] N alloys[J]. *Appl Phys Lett*, 2005, **86**(9): 092108.  
[12] SHAKYA J, KIM K H, LIN J Y, *et al.* Enhanced light extraction in III-nitride ultraviolet photonic crystal light-emitting diodes[J]. *Appl Phys Lett*, 2004, **85**(1): 142-144.  
[13] XU Zhen-feng, SU Ping, CAO Liang-cai, *et al.* Design of a high extraction efficiency light-emitting diode with two crossed grating structures [J]. *Infrared and Laser Engineering*, 2007, **36**(5): 715-717.  
许振丰,苏萍,曹良才,等.具有双光栅结构的高提取效率发光二极管的设计[J]. *红外与激光工程*, 2007, **36**(5): 715-717.  
[14] KIKUTA H, HINO S, MARUYAMA A, *et al.* Estimation method for the light extraction efficiency of light-emitting elements with a rigorous grating diffraction theory [J]. *Optical Society America*, 2006, **23**(5): 1207-1213.  
[15] BADANO A, KANICKI J. Monte carlo analysis of the spectral photon emission and extraction efficiency of organic light emitting devices[J]. *J Appl Phys*, 2001, **90**(4): 1827-1830.  
[16] XIA Chang-sheng, LI Zhi-feng, WANG Chong, *et al.* Ray tracing simulation of InGaN/GaN light-emitting diodes with parabolic substrates[J]. *Chinese Journal of semiconductors*,

2006, **27**(1): 100-104.

厦长生,李志锋,王芑,等. 抛物线型衬底 InGaN/GaN 发光二极管的模拟研究[J]. 半导体学报, 2006, **27**(1):100-104.

[17] BAYANHESHIG, QI Xiang-dong, TANG Yu-guo, *et al.*  
The general formula to the diffraction efficiency of

rectangular grating and its phenomenon of missing orders[J].

*Journal of optoelectronics laser*, 2003, **14**(10): 1021-1024.  
巴音贺希格,齐向东,唐玉国. 矩形光栅衍射效率的一般表达式及其缺级现象[J]. 光电子激光, 2003, **14**(10):1021-1024.

## Dynamic Relations Between Light Extraction Efficiency and Characteristic Parameters of GaN—based LED with Double-Grating Structure

WANG Ya-wei<sup>1a</sup>, LIU Ren-jie<sup>1b</sup>, JIN Ji<sup>2</sup>, LIU Ming-li<sup>1b</sup>

(1a. Faculty of Science; b. School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China)

(2 College of Metrology and Measurement Engineering, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China)

**Abstract:** In order to solve the low external quantum efficiency of the GaN-based LED caused by the total reflection, which occurs at the semiconductor-air interface, the Monte Carlo and wave theory are applied to simulate based on the basic structure of the GaN—based LED with double gratings, and the impact of the main loss of photon on the extraction efficiency is analyzed. Through the numerical simulation, different grating groove depth, period, and the absorption coefficient are applied to analyze the dynamic effects of the LED light extraction efficiency. The results show that light extraction change as similar periodic cosin with the increase of grating groove depth, which is in accordance with the relationship between grating diffraction efficiency and grating depth; the perfect grating period is similar to the wavelength in GaN or ITO. The light extraction efficiency of traditional slab LED decrease slower than grating structure LED with the increase of GaN material absorption coefficient. The depth and period both in transmitted and reflected gratings are 350 nm, 300 nm, and 230 nm, 250 nm, respectively. When the light absorption coefficient of GaN value is 0, the maximum light extraction efficiency of 67% can be obtained, while the light extraction efficiency of traditional slab LED is 18.5%. The light extraction efficiency of GaN-based LED can be improved more than 3 times after being applied with double gratings. Light extraction efficiency can be enhanced more effectively by improving crystal quality and decreasing light absorption coefficient.

**Key words:** Optics; Light extraction efficiency; Monte Carlo; LED; Enhancement; Dynamic relation

**WANG Ya-wei** was born in 1957. He is a professor and his research interests focus on optoelectronic materials and devices.

