

文章编号:1004-4213(2010)08-1500-5

光子晶体发光二极管光抽取效率及远场辐射特性的数值研究*

王靖, 吴立军[†]

(华南师范大学 信息光电子科技学院 光子信息技术实验室, 广州 510006)

摘要:运用三维时域有限差分法,研究了完美/缺陷光子晶体特定参量的改变对发光二极管光抽取效率影响,得出优化参量.基于近场远场转换,进一步分析了两种不同类型的缺陷引入及其周边空气孔半径的改变对光子晶体发光二极管远场辐射特性的影响.数值研究的结果表明,通过引入缺陷以及减小缺陷周围空气孔半径能够同时提高光子晶体发光二极管的光抽取效率和远场辐射方向性.

关键词:发光二极管;光子晶体;时域有限差分法;抽取效率;远场辐射

中图分类号:O4

文献标识码:A

doi:10.3788/gzxb20103908.1500

0 引言

发光二极管(Light Emitting Diode, 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前景.然而,由于发光二极管有源层的半导体材料与外界空气之间的折射率差异所导致的全反射现象使得只有极少的一部分光能够辐射出去,大部分光被限制在LED中形成导波模,以其他形式的能量消耗.粗略估计,传统LED的抽取效率大概为 $1/4n^2$.以GaN为例,仅4%左右的光能够从单表面辐射出来^[1].为了提取更多的光,研究人员们提出了很多办法来提高抽取效率,比如光子循环利用^[2],耦合表面等离子模式^[3],表面粗糙^[4]等.

随着1987年Yablonovitch和S. John提出光子晶体^[5-6]的概念以来,人们发现利用光子晶体平板结构的布拉格散射能够提高LED的抽取效率^[7-9].同时,为了使发光特性适用于某些实际领域例如光耦合,人们对LED出射光的远场能量分布特性进行了研究^[10].不依赖外界光学器件,通过对光子晶体特定的优化设计控制LED出射光的方向,能够极大地减小LED的尺寸,在集成器件方面有着广泛的应用前景.

以前对于光子晶体LED的研究中,大部分结构是基于完美(无缺陷)光子晶体平板结构.本文提出

利用缺陷光子晶体平板结构来提高LED的光抽取效率和改变其远场辐射分布特性.本文研究方法是利用三维时域有限差分法(Finite Difference Time Domain, FDTD)得到近场相关电磁场数据,然后基于近场远场变换,得出远场能量分布来研究LED的远场辐射特性.数值研究表明,结构被优化的缺陷光子晶体不但能够提高LED的出光效率,而且同时能够控制LED的远场辐射在一个小角度范围内.

1 数值分析

FDTD^[11]被广泛应用于描述光在复杂结构下的传播散射行为.本文利用三维FDTD计算LED光抽取效率以及近场信息,然后通过近远场转换得出远场辐射能量分布.

1.1 基本模型

为简化模型,本文忽略了金属电极的影响以及介质材料的吸收,选取了一块均匀的GaN介质平板作为普通的GaN LED,光子晶体LED则是在平板GaN LED中引入有限高度的三角对称排列圆形空气柱而成,如图1.

为了保持计算精确度以及数值稳定性,在FDTD模拟中,格子(Grid Size)的划分应该足够小;另外考虑到常用普通计算机内存(2GB)的限制,本文选取的网格长度约为 $(\lambda/n)/15$,其中 λ 为真空中发光中心波长, n 为介质折射率.整个FDTD模拟区域为 $5.5 \mu\text{m} \times 5.5 \mu\text{m} \times 0.9 \mu\text{m}$,其中GaN LED所占空间为 $5.5 \mu\text{m} \times 5.5 \mu\text{m} \times 0.5 \mu\text{m}$.GaN介质折射率为2.48,外界空气折射率为1.在整个模拟区域

*国家自然科学基金(10774050)和广东省高等学校科技创新团队项目(06CXTD)资助

[†] Tel: 020-39310366

Email: ljwu@scau.edu.cn

收稿日期: 2010-03-09

修回日期: 2010-04-13

的边界引入完美匹配层(Perfectly Matched Layer, PML)以抑制计算边界的光反射. 一个发光中心波长为 520 nm 的高斯调制正弦激发点偶极子光源代表 LED 的有源层, 点光源位于水平面正中心, 离 LED 下表面 0.1 μm . 它的振荡方向平行于 x 轴. 实际上, 点偶极子的个数多少以及在水平方向上的振荡方向对抽取效率的影响不大^[12]. 本文同时探测通过 LED 六个面的能量, 其中 LED 上下两个探测器位置分别离 LED 上下表面 0.2 μm . FDTD 计算时间应该足够的长以使得 LED 能量达到稳态. 抽取效率定义为通过 LED 上下两个探测面的能量和比上通过六个探测面的总能量. 而抽取效率增强因子通过 $E_{\text{PhC}}/E_{\text{noPhC}}$ 计算, 其中 E_{PhC} 和 E_{noPhC} 分别为光子晶体 LED 和普通平板 LED 的抽取效率. 利用此 FDTD 模型计算文献[7-8]中的结构, 能够得到比较一致的结果.

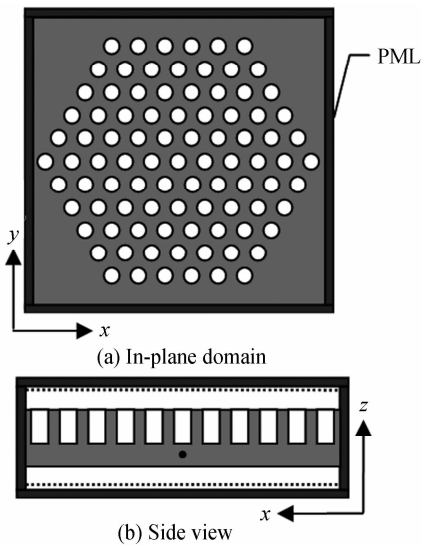


图 1 3D FDTD 计算区域示意图. 三角排列圆形空气孔嵌入 GaN 介质, 整个计算区域六个面为 PML 所包围
Fig. 1 Schematic diagram of the simulation domain for the 3D FDTD calculation. The triangular lattice of the air holes etched in GaN dielectric layer

1.2 近场远场变换推导

利用 3D FDTD 计算模型, 得到 LED 近场切向

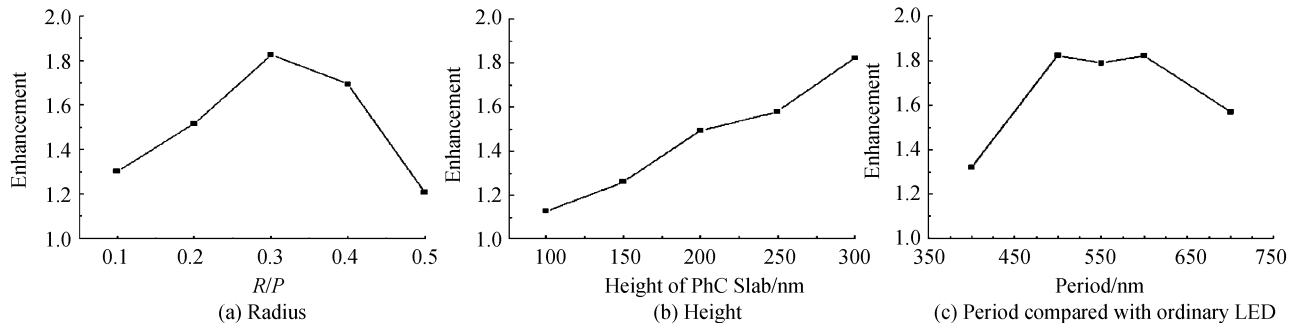


图 2 完美光子晶体 LED 相对于平板 LED 抽取效率的增强随光子晶体参数的变化

Fig. 2 Enhancement of extraction efficiency for perfect PhC LED variation with structure parameters

场分量 E_x , E_y , H_x , H_y 的振幅以及相位信息. 经过近远场变换, 可以得到单位立体角远场辐射能量强度分布^[11]

$$P(\theta, \phi) = R^2 \langle \mathbf{E} \times \mathbf{H} \rangle \cdot \hat{n} = \frac{\eta}{8\lambda^2} \left(\left| N_\theta + \frac{L_\phi}{\eta} \right|^2 + \left| N_\phi - \frac{L_\theta}{\eta} \right|^2 \right)$$

球面坐标下辐射矢量 \mathbf{N} 和 \mathbf{L} 分别表示为

$$\begin{aligned} N_\theta &= (N_x \cos \phi + N_y \sin \phi) \cos \theta = \\ &(-\text{FT}_2(H_y) \cos \phi + \text{FT}_2(H_x) \sin \phi) \cos \theta \\ N_\phi &= -N_x \sin \phi + N_y \cos \phi = \text{FT}_2(H_y) \sin \phi + \\ &\text{FT}_2(H_x) \cos \phi \\ L_\theta &= (L_x \cos \phi + L_y \sin \phi) \cos \theta = \\ &(\text{FT}_2(E_y) \cos \phi - \text{FT}_2(E_x) \sin \phi) \cos \theta \\ L_\phi &= -L_x \sin \phi + L_y \cos \phi = -\text{FT}_2(E_y) \sin \phi - \\ &\text{FT}_2(E_x) \cos \phi \end{aligned}$$

式中 \hat{n} 为面 S 的单位外法向量, $k = 2\pi/\lambda$ (λ 是真空中发光中心波长), η 为自由空间波阻抗. 需要指出的是, 只有落在光锥内的波矢水平分量才能传播到远场区域. 在本文中, 球面坐标上远场能量分布通过式(1)^[13]近似投影到二维平面上

$$\begin{aligned} \theta &= \pi \sqrt{x^2 + y^2}, \\ \phi &= \text{Arg}(x + yi) \end{aligned} \quad (1)$$

2 模拟结果及分析

2.1 完美(无缺陷)光子晶体 LED

利用 3D FDTD 计算完美光子晶体结构不同参数的改变对 LED 抽取效率的影响. 其中最主要的三个参量为: 光子晶体周期 P 、空气圆柱孔的半径 R 以及高度 h . 轮流扫描这些参量以得出优化值. 在其中某一个参量在扫描的时候, 另外两个参量将保持初始值不变. 初始值的设置为: P 为 500 nm, R 为 0.3 P , h 为 300 nm.

首先保持光子晶体周期和圆柱孔高度不变, 扫描圆孔半径从 0.1 P 到 0.5 P , 扫描间隔为 0.1 P . 图 2(a)列出了抽取效率增强因子随光子晶体半径改变

的结果.可以看出在 $R=0.3P$ 与 $R=0.4P$ 之间抽取效率达到极大值, R 太小或太大的时候,光子晶体结构趋近于普通平板,因此抽取效率会达到极小值.

然后再保持光子晶体周期和半径不变,改变圆柱孔高度,研究其对抽取效率的影响.扫描厚度从 $0.1\ \mu\text{m}$ 到 $0.3\ \mu\text{m}$,扫描间隔为 $0.05\ \mu\text{m}$.从图 2(b) 可以得知在一定高度变化范围里,随着光子晶体平板厚度增加,光抽取效率也增大.

最后保持光子晶体半径和圆柱孔高度不变,改变光子晶体的周期,得到图 2(c).可以看出在 $500\sim 600\ \text{nm}$ 之间,抽取效率最大.最大抽取效率大约在周期等于真空中光波长处取得,这是因为当周期远大于真空中光波长时,材料更加均匀导致散射效果减弱.

普通平板 LED 的近场能量分布如图 3(a),可以看出,近场能量比较集中在计算区域中间位置,这是由于全反射导致普通平板 LED 只能在一个很小的光锥范围内出光.图 3(b) 是普通平板 LED 的远场能量分布图,可以看出平板 LED 的远场是一个近似的郎伯分布.而相比于普通平板 LED 的近场,如图 3(c) 是完美光子晶体 LED 的近场能量分布在非常大的区域里,这是光子晶体散射作用的体现.图 3

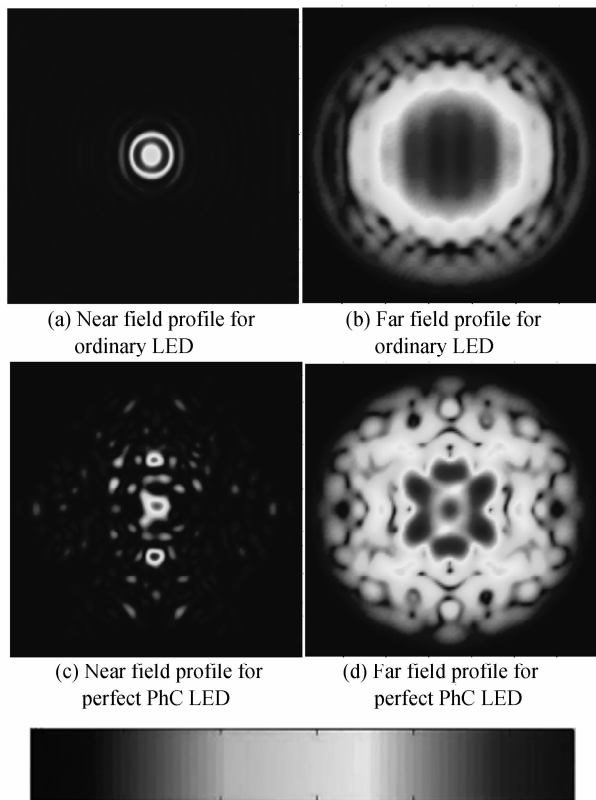


图 3 普通平板 LED 的近场图远场图和优化参数完美光子晶体 LED 的近场和远场图

Fig. 3 Near field profile and far field profile for ordinary plane LED; the near field profile and far field profile for perfect PhC LED with optimum parameters

(d) 是完美光子晶体 LED 的远场能量分布图清晰的体现了光子晶体三角排列的对称特性,正中心的能量斑强度低于其周边六个能量斑强度.可以看出,无论是普通平板 LED 还是完美光子晶体 LED,其远场辐射能量都不集中. x 轴和 y 轴方向能量分布的区别来源于点光源偶极子振荡方向的选取,我们这里的振荡方向选的是 x 方向.

2.2 缺陷光子晶体 LED

本文在优化参量 ($R=0.3P$, $P=500\ \text{nm}$, $h=300\ \text{nm}$) 的完美光子晶体平板结构上,通过去掉部分空气柱(形成缺陷),构建新型的含缺陷光子晶体平板结构.另外通过适当的调节缺陷周边的空气柱的孔半径 r ,以研究其对抽取效率以及远场能量分布的影响.

在图 1 完美结构的基础上,去掉正中央空气孔柱,形成一个缺陷,如图 4(a),称之为结构 1,其中缺陷周围六个最邻近的空气孔柱的半径为 r ,用虚线圆圈标示.图 5 列出了结构 1 所形成的光子晶体

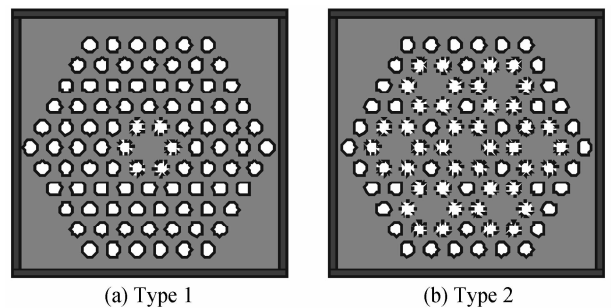


图 4 缺陷光子晶体

Fig. 4 PhCs with defect

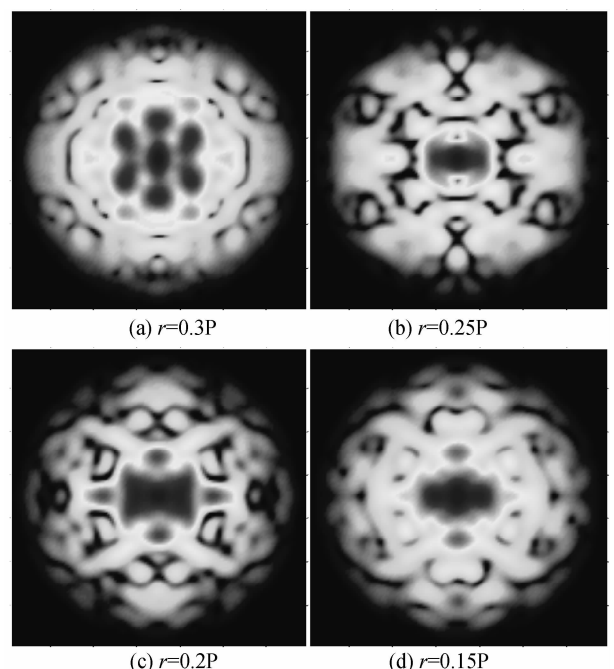


图 5 结构 1 光子晶体 LED 不同 r 值的远场图形

Fig. 5 Far field intensity plots for type 1 with different value of r

LED 中,缺陷周围空气孔半径 r 的改变对远场辐射能量的影响. 当 $r=0.3P$ 时,图 5(a)的远场图形依然体现了三角对称光子晶体的对称性,但与图 3(d)有所不同的是,远场图正中心的能量斑较周围六个能量斑点强,也就是说能量开始往正中心集中. 而当 r 半径继续减小的时候,远场图形 5(b~d)都非常明显的表现出能量集成的特性,在一个较小的极角范围里,能量得到很大的提高. 我们认为这是因为缺陷的存在形成了一个谐振腔,使出射光的能量更加集中.

进一步在结构 1 的基础上,每隔三个周期去掉一个空气孔柱形成多个缺陷,构成结构 2,所有缺陷周边最邻近的六个空气孔柱的半径 r 值相等,同步改变. 多个缺陷光子晶体 LED 的远场能量分布图如图 6,可以看出, r 改变时远场能量分布的变化趋势与对应的图 5 中的远场能量分布变化趋势类似. 但是图 6(a)较之图 5(a)来说,能量斑点之间界限更清楚,也就是能量更加集中. 同样,图 6 中其它远场辐射分布图与 r 值相同的图 5 相比,能量更大程度的集中在中心区域. 本文分析这是因为多个缺陷形成的多个谐振腔之间相互作用,因此使得能量能够更加集中.

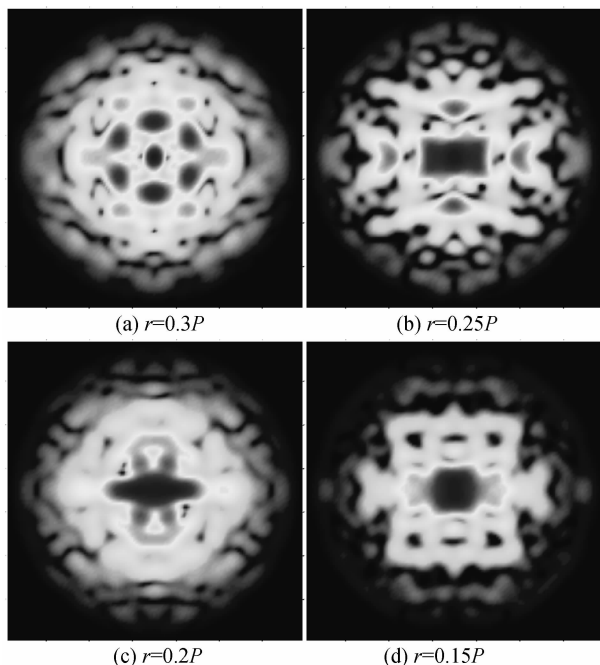


图 6 结构 2 光子晶体 LED 不同 r 值的远场图形
Fig. 6 Far field intensity plots for type 2 with different value of r

另外在表 1 中列出了缺陷光子晶体 LED 不同 r 值时相对于普通平板 LED 的抽取效率的增强.

同普通平板 LED 相比,本文所选取的缺陷光子晶体结构都能使 LED 抽取效率得到不同程度的提高,最高可达到 2.17 倍,最低也可提高 1.55 倍. 同

表 1 结构 1 和结构 2 缺陷光子晶体 LED 不同 r 值时相对于普通平板 LED 的抽取效率增强因子

Table 1 Enhancement factor of the extraction efficiency for the PhC LED (type1 and type 2) with different value of r , compared with ordinary LED

r	$0.3P$	$0.25P$	$0.2P$	$0.15P$
Type 1	1.75	1.55	2.17	1.99
Type 2	1.92	1.74	1.85	1.70

时也可以看出,缺陷光子晶体同完美光子晶体提高倍数 1.82 相比,抽取效率增强因子在 0.85 到 1.2 之间,说明抽取效率有一定的变化,但是变化的程度不会太大. 抽取效率的变化是因为缺陷以及空气柱孔不同半径所导致的更加强烈多样的散射作用.

3 结论

通过 3D FDTD 数值论证,本文得出完美光子晶体 LED 在 $R=0.3P, P \approx \lambda, h=300 \text{ nm}$ 时取得最大抽取效率,增强因子为 1.82. 当在完美光子晶体中引入缺陷后,缺陷光子晶体 LED 的抽取效率相对于普通平板 LED 来说,均可以得到不同程度的提高,增强因子从 1.55 到 2.17. 同时,缺陷的引入改善了远场辐射的方向性;进一步减小缺陷周围空气柱的半径,可以更大的提高远场辐射的垂直方向性. 而且,由于多个缺陷光子晶体 LED 缺陷之间的相互作用,其光子晶体 LED 远场辐射的垂直方向性比单个缺陷光子晶体 LED 的更强. 这种同时具有高抽取效率和小发散角的 LED 在光电集成领域具有广阔的应用前景.

参考文献

- [1] SCHUBERT E F. Light-emitting diodes [M]. 2nd. Cambridge: Cambridge University Press, 2006: 86-87.
- [2] SCHNITZER I, YABLONOVITCH E, CANEAU C, et al. Ultrahigh spontaneous emission quantum efficiency, 99.7% internally and 72% externally, from AlGaAs/GaAs/AlGaAs double heterostructures[J]. *Appl Phys Lett*, 1993, **62**(2): 131-133.
- [3] VUCKOVIC J, LONCAR M, SCHERER A. Surface plasmon enhanced light-emitting diode[J]. *IEEE J Quant Elect*, 2000, **36**(10): 1131-1144.
- [4] FUJII T, GAO Y, SHARMA R, 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] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid state physics and electronics[J]. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(20): 2059-2062.
- [6] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Phys Rev Lett*, 1987, **58**(23): 2486-2489.
- [7] LI Yan, ZHENG Rui-sheng, FENG Yu-chun, et al. Influence of disordered photonic crystal on light extraction of a kind of light emitting diode model[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2006, **35**(6): 903-905.

- [8] RYU H Y, HWANG J K, LEE Y J, *et al.* Enhancement of light extraction from two-dimensional photonic crystal slab structures[J]. *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics*, 2002, **8**(2): 231-237.
- [9] AURÉLIEN D, HENRI B, CLAUDE W. Optimization of light-diffracting photonic-crystals for high extraction efficiency LEDs[J]. *J Display Technology*, 2007, **3**(2): 133-148.
- [10] LAI C F, CHI J Y, KUO H C, *et al.* Far-field of GaN film-transferred green light-emitting diodes with two-dimensional photonic crystals[J]. *Opt Express*, 2009, **17**(11): 8795-8804.
- [11] ALLEN T, SUSAN C H. Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method [M]. 2nd ed. Norwood: Artech House Publishers, 2000.
- [12] BUSS I J, CRYAN M J, NASH G R, *et al.* Three-dimensional parallel FDTD simulation of light-emitting diodes [C]. *Computation in Electromagnetics, CEM 2008, 2008 IET 7th International Conference, 2008*: 100-101.
- [13] SHIN D J, KIM S H, HWANG J K, *et al.* Far- and near-field investigations on the lasing modes in two-dimensional photonic crystal slab lasers[J]. *IEEE J Quant Electron*, 2002, **38**(7): 857-866.

A Numerical Study of Influence of Photonic Crystals on the Light Extraction Efficiency and Far Field Radiation Characteristics of Light-Emitting Diode

WANG Jing, WU Li-jun

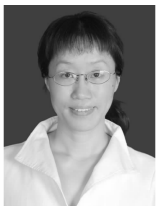
(Laboratory of Photonic Information Technology, School for Information and Optoelectronic Science and Engineering, South China Normal University, Guangzhou 510006, China)

Abstract: By utilizing the 3D finite-difference time-domain technique, the influence of the photonic crystals with various structure parameters on the light extraction efficiency of light-emitting diode (LED) are studied. Based on the near to far field transformation, the far field radiation characteristics of PhC LEDs for two types of defect with different hole size are investigated. It is found that the light extraction efficiency and energy directionality in the far field radiation can be improved by incorporating defect into the PhCs and decreasing the hole size near to the defect.

Key words: Light-emitting diode; Photonic crystals; Finite-difference time-domain technique; Extraction efficiency; Far field radiation



WANG Jing was born in 1985. He is currently working toward his M. S. degree, and his research interests focus on the photonic crystal LED.



WU Li-jun was born in 1971. She received her Ph. D. degree from Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences in 2000. Now she is a professor, and her current interests focus on fabricating complex periodic nano/microstructures and their interaction with fluorescent nanoparticles, the influence of surface plasmon polaritons on fluorescent nanoparticles, and numerical modeling on photonic crystal-related devices.