

基于正方和六角排列结构光子晶体对发光 二极管出光效率的研究*

陈 健¹⁾ 李小丽^{1,2)} 李海华¹⁾ 王庆康^{1)†}

1) (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,上海交通大学微纳科学技术研究院,上海 200240)

2) (上海市纳米科技与产业发展促进中心,上海 200237)

(2008 年 12 月 9 日收到,2008 年 12 月 31 日收到修改稿)

采用时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD) 方法计算正方和六角排列圆形光子晶体的能带结构,研究了光子晶体占空比对能带的影响,找到一组获得带隙个数最多的二维光子晶体的几何结构参数,采用 FDTD 方法计算具有该参数的光子晶体的发光二极管 (LED) 出光效率. 模拟表明该结构参数的正方和六角排列圆形光子晶体提高了 GaN 基蓝光 LED 出光效率 5—6 倍,六角排列优于正方排列. 利用禁带理论、等效介质理论分析了增透机理.

关键词:光子晶体,能带,出光效率,发光二极管

PACC: 4225B, 4270Q, 7125C, 7820P

1. 引 言

以 GaN 为基底的 LED 具有长使用寿命 (可大于 10^6 h) 而且体积小,重量轻,已被广泛应用于显示、照明和通信等领域. 同时,为全固态照明大型节省能源提供可行的选择. 不过,相对高效率的常规光源,要使发光二极管具有竞争力,所有方面的效率需要加以优化^[1]. 由于 LED 所使用的材料的折射率 n 很高,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,导致出光效率受到很大的限制^[2]. 如果能将发光二极管的效率提高到 50% 以上,则发光二极管将全面取代白炽灯,这将是一个非常广阔而诱人的市场.

人们曾经尝试发光表面粗糙化、镀增透膜、光子循环利用、谐振腔增强等办法,出光效率都有不同程度的提高. 近年来,在 GaN 层上引入光子晶体 (PC) 以提高光提取率成为人们的研究热点^[3-7]. 主要利用 PCs 的带隙结构提高 LED 的出光效率. 带隙是被用来禁止导模,而这些导波模式直接被 PCs 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,PCs 可以通过布拉格散射使这些模式耦合成为辐射模式^[1,8].

GaN 基蓝光 LED 基本结构如图 1 所示. 本文在 GaN ($n = 2.4 + i0.002$) 层上引入 PCs, 研究正方排列和六角排列的圆形 PCs 结构不同占空比 ($R_p = 0.1 \sim 0.9$, r 为圆形 PCs 的半径, a 为周期) 对带隙进行调制. 根据不同 R_p 对带隙的影响,找出最佳的 R_p 和归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$, 从而可以得出光子晶体的最佳参数,用 FDTD 方法对其进行数值模拟实验加以验证,从而为高性能 LED 结构的设计提供依据.

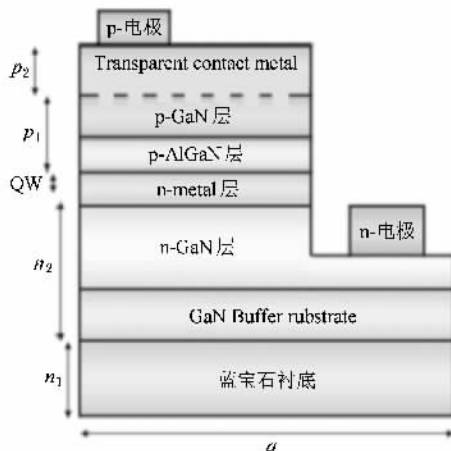


图 1 GaN 基蓝光 LED 基本结构

* 上海市科委科技基金 (批准号 0752nm014) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wangqingkang@sjtu.edu.cn

2. 光子晶体的能带分析

2.1. 正方形排列的圆形 PCs 结构能带分析

本文首先研究如图 2 所示光子晶体不同占空比对光子禁带的影响,图 3—5 为 $R_p = 0.3—0.8$ 时光子晶体的能带结构.

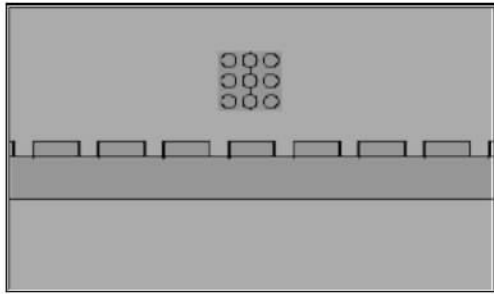


图 2 正方形排列的圆形 PCs 结构 x-y 平面视图

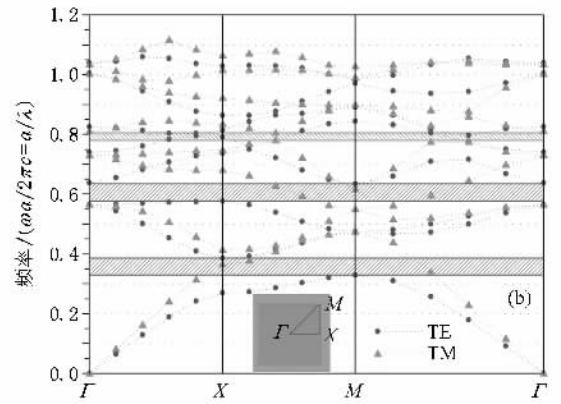
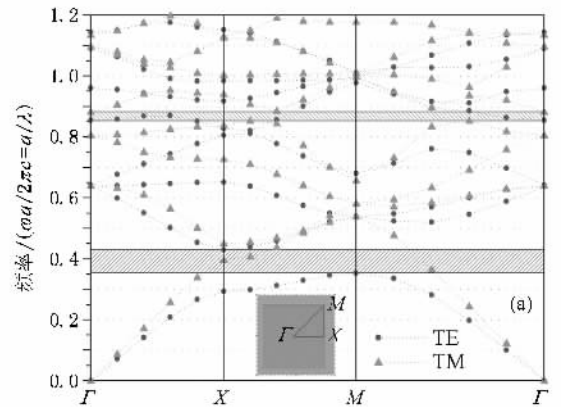


图 4 (a) $R_p = 0.5$ 时正方形排列的圆形 PCs 能级结构 ;(b) $R_p = 0.6$ 时正方形排列的圆形 PCs 能级结构

由计算结果可知 :当 $R_p = 0.1, 0.2$ 时没有禁带.

如图 3(a)所示, $R_p = 0.3$ 时,有两个 E 偏振禁带,归一化频率范围分别为 $0.445—0.491, 0.948—0.977$ (TE) 禁带宽度为 $0.046, 0.029(a/\lambda)$,归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 分别为 $0.468, 0.963$;如图 3(b), $R_p = 0.4$ 时,一个 E 偏振禁带 : $0.392—0.469$ (TE), 禁带宽度为 $0.077(a/\lambda)$;归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 为 0.43 .

如图 4(a)所示, $R_p = 0.5$ 时,两个禁带,一个 E 偏振带隙,一个 H 偏振带隙 : $0.354—0.434$ (TE), $0.853—0.884$ (TM), 禁带宽度为 $0.08, 0.031(a/\lambda)$, f_0 分别为 $0.394, 0.869(a/\lambda)$;如图 4(b), $R_p = 0.6$ 时,三个禁带,两个 E 偏振带隙,一个 H 偏振带隙 : $0.329—0.386, 0.577—0.637$ (TE), $0.780—0.807$ (TM) 禁带宽度为 $0.057, 0.06, 0.027(a/\lambda)$, f_0 分别为 $0.358, 0.607, 0.794(a/\lambda)$.

从图 5(a)可知,当 $R_p = 0.7$ 时,有四个禁带,两个 E 偏振带隙,两个 H 偏振带隙 : $0.313—0.344, 0.527—0.571$ (TE), $0.709—0.734, 0.89—0.903$

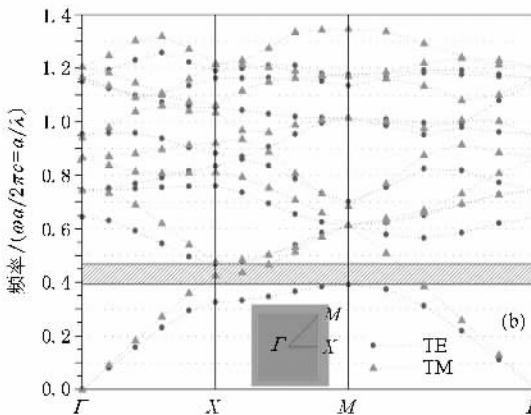
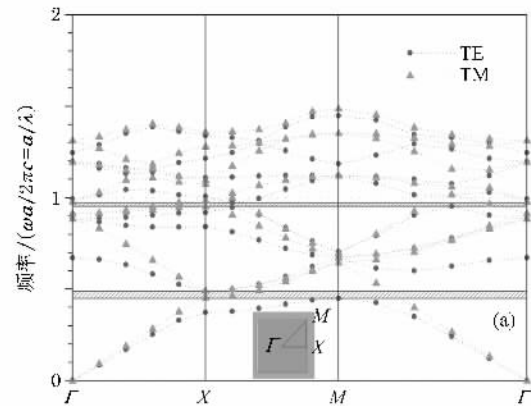


图 3 (a) $R_p = 0.3$ 时正方形排列的圆形 PCs 能级结构 ;(b) $R_p = 0.4$ 时正方形排列的圆形 PCs 能级结构

(TM),禁带宽度分别是 0.031 ,0.044 ,0.025 ,0.013
 (a/λ) $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.329 0.549 0.722 0.897.

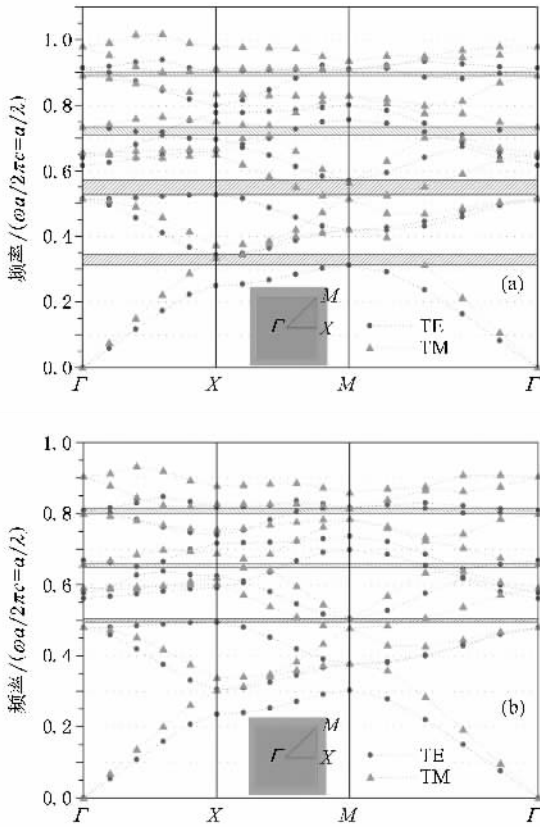


图 5 (a) $R_p = 0.7$ 时正方排列的圆形 PCs 能级结构 ;(b) $R_p = 0.8$ 时正方排列的圆形 PCs 能级结构

如图 5(b)所示, $R_p = 0.8$ 时,三个禁带,一个 E 偏振带隙,两个 H 偏振 :0.495—0.506(TE),0.65—0.66,0.799—0.817(TM),禁带宽度为 0.011,0.01,0.018(a/λ) $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.5,0.655,0.808 ; $R_p = 0.9$ 时,无禁带.

2.2. 六角排列的圆形 PCs 结构能带分析

同理,对于如图 6(a)所示的 PCs,当 $R_p = 0.6$ 时能带结构如图 6(b)所示,四个禁带,三个 E 偏振带隙,一个 H 偏振带隙 :0.318—0.412,0.585—0.685,0.881—0.932(TE),1.008—1.024(TM),禁带宽度分别是 0.094,0.099,0.051,0.015(a/λ) $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.364,0.635,0.906,1.017.

可见,改变占空比 R_p 的值可以对带隙进行调制,禁带个数,禁带位置,禁带宽度都随着 R_p 而变化.随着 R_p 的增大,禁带边界频率下降,这是由于 GaN 光子晶体的空气部分比例减小,从而导致其平均介电常数变大.图 7 为两种结构占空比对禁带宽

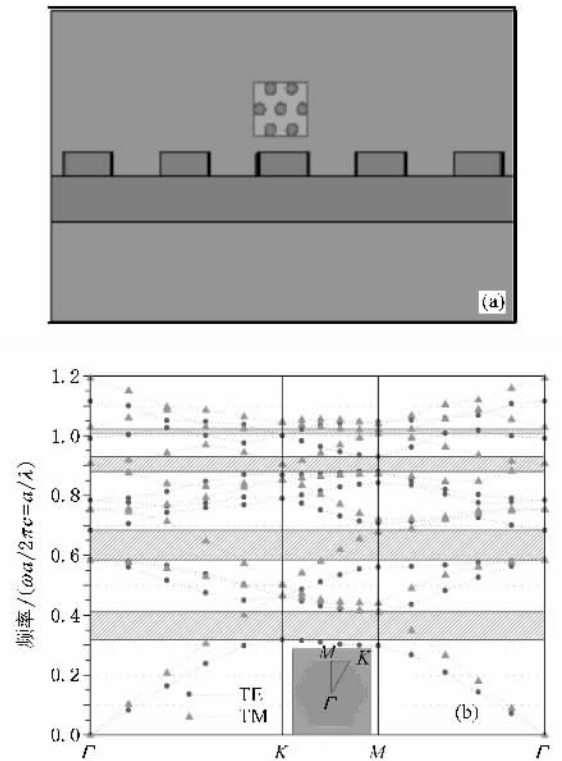


图 6 (a)六角排列的圆形 PCs 结构 x-y 面视图 ;(b) $R_p = 0.6$ 时六角排列的圆形 PCs 能级结构

度的影响,结果表明,占空比存在一个最佳值,使 PCs 带隙宽度最大.当 $R_p < 0.7$ 时,E 偏振带隙个数随着 R_p 增大在增多,这是由于随着 R_p 的增大,平均介电常数变大,而孤立的高介电常数区域有利于 E 偏振带隙的产生^[9];当 $R_p > 0.5$ 时,H 偏振带隙个数是随着 R_p 的增大在增多,这是由于随着 R_p 的增大,PCs 的介质部分在增大,介质之间的空气部分减少,形成近似的互连网络,而互连的网络结构有助于 H 偏振带隙的产生^[9].

由于禁带有助于提高 LED 的光提取效率,对于正方排列的圆形 PCs,我们取 $R_p = 0.7$,有四个带隙,此时禁带中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 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 PCs 的周期 $a = f_0 \times \lambda$ 分别为 151.34 nm,252.54 nm,332.12 nm,412.62 nm.根据实现工艺的难易程度,我们取 $a = 412$ nm,圆形 PCs 的半径 $r = 144.2$ nm;同理,对于六角排列, $a = 468$ nm, $r = 140.4$ nm.用 FDTD 对此结构参数的 PCs 进行数值模拟实验,检验此结构参数的 PCs 是否对发光波长为 460nm 的蓝光有增透作用,并比较两种结构对 LED 出光效率的影响.

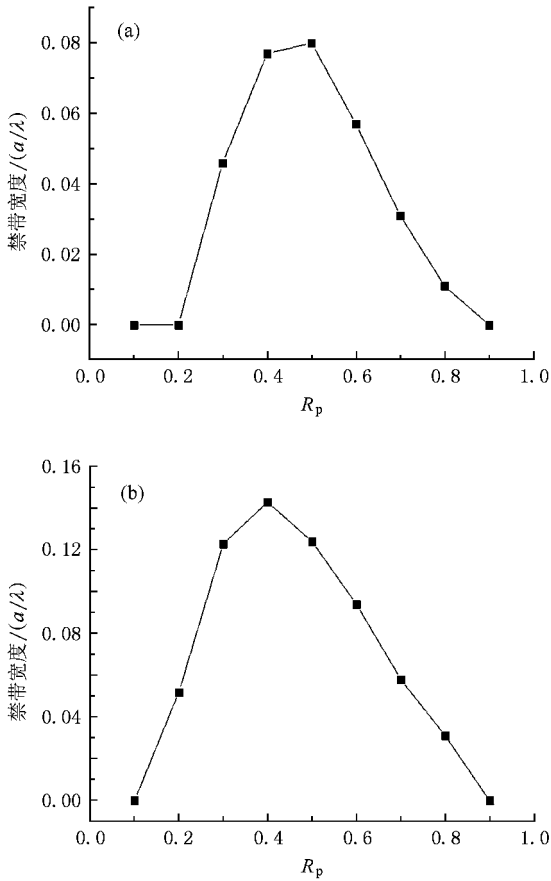


图7 (a)正方排列(b)六角排列圆形 PCs 的禁带宽度与占空比之间的关系

3. FDTD 数值模拟实验与分析

3.1. FDTD 方法

FDTD 法是求解电磁场 Maxwell 方程的通用方法.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分代替微商,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,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

$$\begin{aligned}
 & E_x^{n+1}(i+1/2, j, k) \\
 &= E_x^n(i+1/2, j, k) \\
 &+ \frac{\Delta t}{\epsilon(i+1/2, j, k+1/2)\delta} \\
 &\times \left[\begin{aligned} & H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) \\ & - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2, k) \\ & - H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k+1/2) \\ & + H_y^{n+1/2}(i+1/2, j, k-1/2) \end{aligned} \right] \quad (1)
 \end{aligned}$$

$E_x^{n+1}(i+1/2, j, k)$ 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 为离散步长.模拟中截取了 $x-z$ 平面 $2\mu\text{m} \times 2.5\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$ 的计算单元.为了能够精确还原,在 $x-z$ 平面四边设置了周期性边界,并且在光子到达像素边界所需的平均时间上对能量进行积分,同时在 y 轴设置完全匹配层(PML)边界条件^[10].

3.2. 正方排列和六角排列的圆形 PCs 结构的 R_p 对 LED 出光效率的影响

LED 系统结构中 GaN 层的厚度 $\text{height GaN} = 300\text{ nm}$.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.我们主要研究的中心波长 $\lambda_0 = 460\text{ nm}$,则 PCs 的高度 $\text{height PCs} = 115\text{ nm}$.

定义 PCs 亚波长结构 LED 相对出光效率 E_r 为该 PCs 亚波长结构 LED 出光效率 E 与无 PCs 亚波长结构 LED 出光效率 E_0 的比值.入射光波长为 460 nm ,得到的正方排列和六角排列的圆形 PCs 结构参数 R_p 对 LED 出光效率影响如图 8 所示.对于正方排列,固定周期 a 为 412 nm 时,占空比 $R_p = 0.7$ 时,出光效率最大,与上述能带计算结果是一致的,在 $R_p = 0.7$ 时出光效率提高了 5 倍;对于六角排列,结论也是一致的,在 $R_p = 0.6$ 时出光效率提高了 6.2 倍.无 PCs 时, GaN 基蓝光 LED 出光效率大约为 5% ($\sim 1/4n^2$)^[3,11,12],引入正方和六角排列 PCs 后出光效率分别为 30%、36%.可见,六角排列比正方排列的效果更好,比后者提高了 20%.

对于二维对称的亚波长增透结构而言,其等效

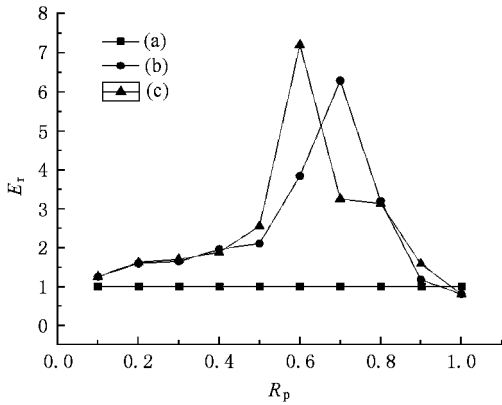


图 8 (a)无 PCs (b)正方排列 (c)六角排列圆形 PCs 结构 LED 的 E_r 随 R_p 的变化

折射率有以下几种求法^[13]：

$$n_{2D}^2 = (1-f)n_i^2 + fn_s^2, \quad (2)$$

$$n_{2D}^2 = \frac{[(1-f)n_i^2 + fn_s^2][fn_i^2 + (1-f)n_s^2] + n_i^2 n_s^2}{2[fn_i^2 + (1-f)n_s^2]}, \quad (3)$$

$$(1-f)\frac{n_s^2 - n_i^2}{n_s^2 - n_{2D}^2} = \frac{n_i}{n_{2D}}, \quad (4)$$

其中, n_i 为空气折射率, n_s 为衬底折射率, n_{2D} 为等效折射率, f 为占空比. 此处占空比 f 是单位周期内的填充因子, 即单位周期内的衬底介质占的面积比,

而 $R_p = \frac{2r}{a}$ 则 $f = \frac{\pi r}{2a} = \frac{\pi R_p}{4}$. (2) 式和耦合波理论的结果差距最大, (3) 式在 $n_s < 1.5$ 时, 与耦合波理论的结果匹配较好, (4) 式在 $1.5 < n_s < 4$ 时, 与耦合波理论的结果匹配比较好. 因此, 用 GaN 做基底时, 二维亚波长增透结构占空比与等效折射率的关系式应选用 (4) 式, 其占空比与等效折射率的关系曲线如图 9. 对于正方排列, 当 $R_p = 0.7$ 时, $f = 0.5495$, 代入 (4) 式, 可得 $n_{2D\text{cubic}} = 1.556$; 对于六角排列, 当 $R_p = 0.6$ 时, $f = 0.5439$, $n_{2D\text{hexagonal}} = 1.5495$. 根据等效介质理论可以知道, 等效折射率是占空比的函数, 而反射率是等效折射率的函数, 二维亚波长增透结构的反射率与占空比的函数关系式是^[14]

$$R = \left(n_s - \frac{n_{2D}^2}{n_i} \right) \left(n_i + \frac{n_{2D}^2}{n_s} \right)^2, \quad (5)$$

其中, n_{2D} 由 (4) 式确定, 图 10 是反射率与等效折射率的关系曲线. 将 $n_{2D\text{cubic}} = 1.556$ 代入 (5) 式, 可得反射率 $R = 0.01\%$, 将 $n_{2D\text{hexagonal}} = 1.5495$ 代入, 可得 $R = 2.25 \times 10^{-7}$, 基本为零, 与图 10 所示关系曲线相符合. 所以两种结构对出光效率都有了较大的提高,

六角结构提高的程度更大, 效果更显著.

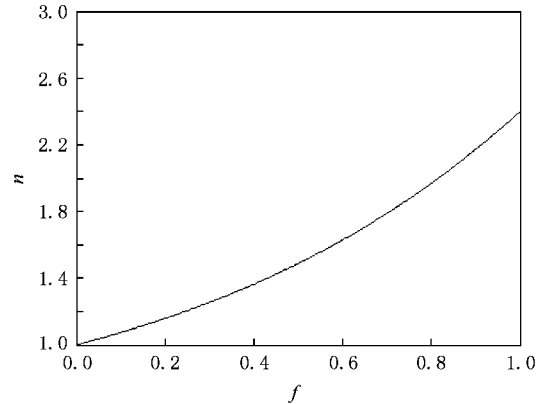


图 9 等效折射率与占空比的关系曲线

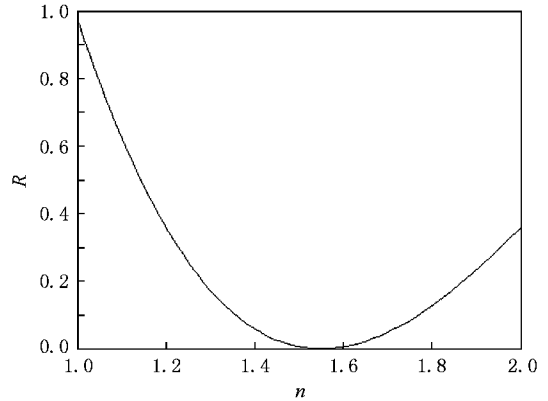


图 10 反射率与等效折射率的关系曲线

4. 结 论

GaN 基蓝光 LED 在无 PCs 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 PCs 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. 通过改变不同结构 PCs 的占空比可以对其能带进行调制, 而禁带的存在一方面直接将带隙中的导波直接耦合为辐模, 另一方面也可以将导波通过衍射进入空气, 从而可以提高 LED 的光提取效率. 由 FDTD 模拟结果可知, 通过调制能带而得出合适参数的 PCs 确实提高了 LED 的出光效率, 其中六角结构对出光效率的提高优于正方结构. 通过进一步优化六角 PCs 的结构及其几何参数, LED 的出光效率将会进一步提高. 而且改变 PCs 的结构和占空比, 可以对不同波长的光进行增透, 即可以提高不同发光波长的 LED 的出光效率.

- [1] Aurélien D , Henri B , Claude W 2007 *J. Display Technol.* **3** 133
- [2] Zhang X S , Liu S , Liu Y , Chen X Y , Lin H , Ren X C 2008 *Phys. Lett. A* **372** 3738
- [3] Boroditsky M , Kraus T F , Coccioli R , Vrijen R , Bhat R , Yablonovitch E 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 1036
- [4] Szymanska M H , Hughes A F , Pike E R 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 69
- [5] Fan S H , Villeneuve P R , Joannopoulos J D 2000 *J. Quantum Electron.* **36** 1123
- [6] Matterson B J , Lupton J M , Safonov A F , Salt M G , Bearn W L , Samel I D W 2001 *Adv. Mater.* **13** 123
- [7] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [8] Marko L , Theodor D , Jelena V , Axel S 2000 *J. Lightwave Technol.* **18** 1402
- [9] Zhong K , Zhang H Y , Zhang Y P , Li X F , Wang P , Yao J Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 7029 (in Chinese) [钟凯、张会云、张玉萍、李喜福、王鹏、姚建铨 2007 物理学报 **56** 7029]
- [10] Zhang B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5677 (in Chinese) [张波 2005 物理学报 **54** 5677]
- [11] Aurélien D , Tetsuo F , Rajat S , Kelly M , Shuji N , Steven P D , Evelyn L H , Claude W , Henri B 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 1124
- [12] Wierer J J , Krames M R , Epler J E , Gardner N F , Craford M G , Wendt J R , Simmons J A , Sigalas M M 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 3885
- [13] Raguln D H 1993 USA : The University of Rochester 2036
- [14] Cao Z L , Lu Z W , Li F Y , Zhang H J , Sun Q 2002 *Opt. Precis. Eng.* **6** 537 (in Chinese) [曹召良、卢振武、李凤友、张慧娟、孙强 2002 光学精密工程 **6** 537]

Research of LED light extraction efficiency of photonic crystal with square and hexagonal lattice *

Chen Jian¹⁾ Li Xiao-Li^{1,2)} Li Hai-Hua¹⁾ Wang Qing-Kang^{1)†}

1) (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 Jiaotong University , Shanghai 200240 , China)

2) (Shanghai Nanotechnology Promotion Center , Shanghai 200237 , China)

(Received 9 December 2008 ; revised manuscript received 31 December 2008)

Abstract

Using finite-difference time-domain (FDTD) method , we found the relationship between filling factor and band gap of square and hexagonal array of circular photonic crystal , and obtained the geometric parameters of the 2D photonic crystal , for which the number of bandgaps are the greater. Using FDTD method to calculate the extraction efficiency of the photonic crystals with the parameters , we verified the enhancement in extraction efficiency of the GaN-based blue light-emitting diode based on the square and hexagonal array of circular photonic crystals with the the parameters , and the hexagonal arrangement is better than the square arrangement. By using the bang gap theory and equivalent medium theory was analyzed the mechanism of antireflection.

Keywords : photonic crystal , band gap , extraction efficiency , light-emitting diode

PACC : 4225B , 4270Q , 7125C , 7820P

* Project supported by the Shanghai Committee of Science and Technology , China (Grant No. 0752nm014).

† Corresponding author. E-mail : wangqingkang@sjtu.edu.cn