

双层光子晶体氮化镓蓝光发光二极管结构优化的研究*

高晖¹⁾ 孔凡敏¹⁾ 李康^{1)†} 陈新莲¹⁾²⁾ 丁庆安¹⁾ 孙静¹⁾

1) (山东大学信息科学与工程学院, 济南 250100)

2) (济南大学物理科学学院, 济南 250022)

(2011年9月5日收到; 2011年10月11日收到修改稿)

为了提升氮化镓 (GaN) 蓝光发光二极管 (LED) 光提取效率, 设计了双层光子晶体 LED 模型. 提出等效折射率近似方法, 简化求解了结构中的介质波导模式分布. 从而对模型中顶层光子晶体刻蚀深度 d , 嵌入式光子晶体厚度 T 及其距有源层距离 D 等结构参数进行了优化. 同时利用时域有限差分方法对优化结果进行了验证. 相比其他仿真方法, 模式分析极大地减小了对 LED 建模优化的计算复杂度, 同时从理论上阐明了不同结构参数变化引起 LED 光提取效率改变的原因. 研究发现, 当顶层光子晶体满足 $d \approx \lambda/n_{\text{PhCs}}$ 时, 结构内大部分高阶导模尚未被截断但源区能量向低阶导模的转化被有效抑制, 光提取效率给出极大值. 嵌入式光子晶体的引入将激发覆盖层模式, 当满足 $100 \text{ nm} \leq T \leq 300 \text{ nm}$ 且 $100 \text{ nm} \leq D \leq 200 \text{ nm}$ 时, 覆盖层模式可以从有源层获得较大能量并有效地与顶层光子晶体耦合, 极大地提升了光提取效率. 本文优化结果使得 LED 光提取效率提升了 4 倍, 对高性能 GaN 蓝光 LED 的设计制造具有重要意义.

关键词: 发光二极管, 光子晶体, 模式分析, 时域有限差分

PACS: 78.66.Fd, 78.60.Fi, 78.20.Bh, 52.35.Mw

1 引言

GaN 蓝光 LED 可以作为白光照明的光源, 具有体积小、寿命长、节能环保、可靠性高等诸多优点, 近年来相关研究和应用得到了飞速发展^[1,2]. 但是, 由于 GaN 的折射率与空气折射率之间存在较大差异, 由此引起的全内反射及光线穿透介质与空气界面时的菲涅耳反射极大地降低了 GaN 蓝光 LED 的光提取效率, 制约了其向大规模商业应用的推广. 国内外的研究者们提出了诸多提升 GaN 蓝光 LED 光提取效率的方式. 诸如表面粗化^[3,4]和在表面刻蚀光子晶体^[5,6]等方法. 表面粗化可以使 GaN 蓝光 LED 光提取效率获得小幅提升, 但是不可控性较大, 进一步的优化缺乏详细的理论指导.

表面刻蚀光子晶体的结构减弱了全内反射的限制, 但是依然不能有效地解决结构中低阶导模的提取问题. 由于此部分模式携带能量的比重较大, 因此该方式对光提取效率提升的效果并不明显. Matioli 等人^[7,8]提出在 LED 结构中采用嵌入式光子晶体层, 可以改变原结构中的模式分布, 形成一种新的覆盖层模式 (cap layer mode, CLM). 利用 CLM 可以抑制有源层能量向低阶模式转化, 从而在一定程度上解决了由于顶层光子晶体不能有效提取低阶导模导致 LED 光提取效率较低的问题. 但 CLM 仍携带了大量的能量, 并且局限在靠近源区的 GaN 层中. 如何将这一部分能量有效地提出, 仍需要对这样的 LED 模型进行进一步的优化. 然而, 从文献报道中可以发现, 对于 LED 结构参数的优化, 当前仍然缺乏一种行之有效的手段. 这是因为若采用传

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2009CB930503, 2009CB930501) 和国家自然科学基金 (批准号: 61077043) 资助的课题.

† E-mail: kangli@sdu.edu.cn

统的数值分析方法(如时域有限差分法^[9],有限元法^[10])对LED进行数值模拟,需要在相对较大的尺寸下建模方可给出正确的结果.这使得对LED某一结构参数的优化不可避免地面临巨大的计算量和冗长的计算时间的问题.同时,数值分析方法仍未能从理论上阐明影响GaN蓝光LED的光提取效率的真正原因,不能为结构优化提供完备的理论支持.

考虑到CLM在GaN中的幅值分布类似介质中导模的分布特性,本文在Matioli等提出的嵌入式光子晶体LED模型基础上,在LED结构顶端重新引入表面光子晶体层提取CLM的能量.同时,为了简便地优化相关结构参数,本文提出了运用等效折射率近似对该双层光子晶体GaN蓝光LED模型进行简化,并求解了结构中相应的介质波导模式分布.从理论上优化了表面光子晶体刻蚀深度 d ,嵌入式光子晶体厚度 T 及其距有源层距离 D 等结构参数.从而设计了具有较高光提取效率的双光子晶体GaN蓝光LED模型.本文同时利用时域有限差分方法计算了相应结构的光提取效率值,有效地验证了模式分析方法的正确性和可靠性.本文的结果相比普通LED的光提取效率达到了4倍的增强,对高性能GaN蓝光LED的设计和优化提供了重要理论依据.

2 计算模型和优化方法

本文所讨论的光子晶体均是具有三角晶格空气孔隙的光子晶体^[5].光子晶体的晶格常数为 a ,空气孔隙的半径为 R ,其填充因子可以表示为

$$f = \frac{2\pi R^2}{\sqrt{3}a^2}. \quad (1)$$

已有文献证明^[11],光子晶体填充因子在0.3—0.35范围时,LED具有最佳的光提取效率.本文中对光子晶体的参数选择为 $R = 60 \text{ nm}$, $a = 200 \text{ nm}$;此时 $f \approx 0.33$,满足上述优化条件.

本文重点讨论了顶端深度刻蚀光子晶体和具有嵌入式光子晶体的双光子晶体GaN蓝光LED结构.其仿真模型如图1所示.其中,图1(a)给出了三维结构的模型.沿LED生长方向的二维纵切面示意图如图1(b)所示.自下而上依次为厚度1000 nm的蓝宝石衬底, n-GaN, 有源层和 p-GaN.其中有源层距离顶端出光面的距离为200 nm,整个GaN层厚度为2000 nm.在靠近有源层的n-GaN内引入厚度为 T 的嵌入式光子晶体,标记该嵌入式光子晶体距离有源层的位置为 D .另外,表面光子晶体的刻蚀深度为 d .蓝光的中心波长选为465 nm.

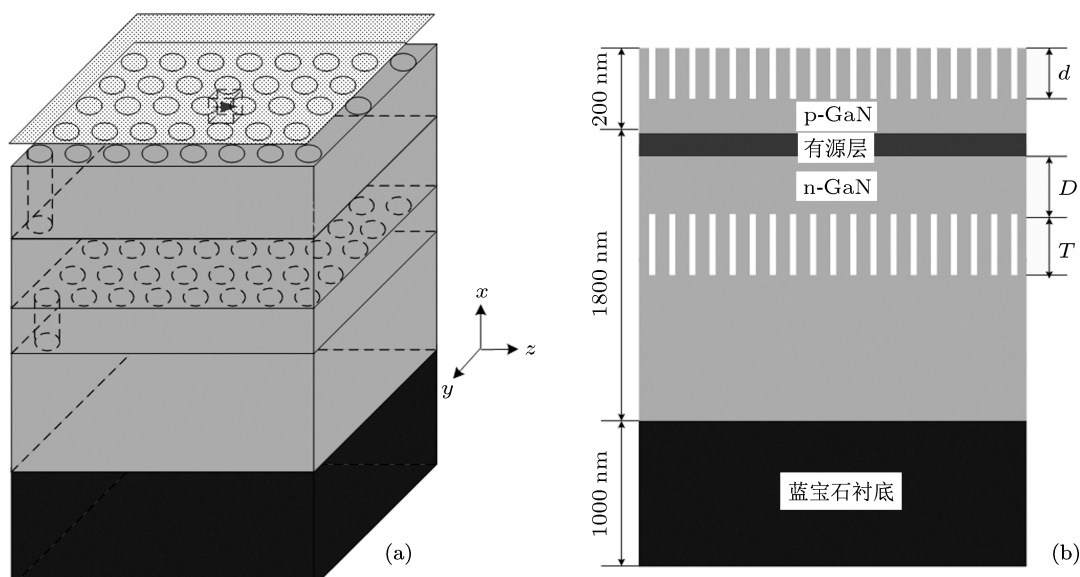


图1 双层光子晶体GaN蓝光LED仿真模型示意图 (a) 三维结构模型; (b) 沿LED生长方向二维模型

本文主要通过求解介质波导模式来对 GaN 蓝光 LED 的结构参数进行优化. 首先需要说明的是, 已有文献证明^[11,12], 无序光子晶体对 LED 光提取效率的提升和规则光子晶体差异不大. 这说明光子晶体对 LED 光提取效率的提升并非由于光子晶体自身的禁带效应及相关的衍射特性. 因此, 为了简化计算, 同时考虑到本文讨论的结构不涉及光子晶体填充因子的改变, 只与 LED 生长方向上尺寸的改变有关, 即光子晶体的等效折射率在整个优化过程中为一定值. 故可以通过等效折射率近似的方式将光子晶体等效为一层均匀介质波导. 这样本文讨论的结构都可以简化成为有限层数的非对称平板波导结构. 其符合的复式麦克斯韦方程组如下所示:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} &= -j\omega\mu_0\mathbf{H}, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= j\omega\varepsilon\mathbf{E}, \\ \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0.\end{aligned}\quad (2)$$

结合物性方程, 由于本文讨论的 GaN 为各向同性非磁性介质, 其满足的光波导界面标量边界条件为

$$\begin{aligned}n_1^2 E_{1n} &= n_2^2 E_{2n}, \\ E_{1t} &= E_{2t}, \\ H_{1n} &= H_{2n}, \\ H_{1t} &= H_{2t}.\end{aligned}\quad (3)$$

在直角坐标系下, 将(2)式展开并化简可得 TE 模式分量 E_y , H_x 和 H_z 满足

$$\begin{aligned}\beta E_y &= -\omega\mu_0 H_x, \\ \frac{\partial E_y}{\partial x} &= -j\omega\mu_0 H_z, \\ j\beta H_x + \frac{\partial H_z}{\partial x} &= -j\omega\varepsilon E_y.\end{aligned}\quad (4)$$

TM 模式分量 H_y , E_x 和 E_z 满足

$$\begin{aligned}\beta H_y &= \omega\varepsilon E_x, \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} &= j\omega\varepsilon E_z, \\ j\beta E_x + \frac{\partial E_z}{\partial x} &= j\omega\mu_0 H_y,\end{aligned}\quad (5)$$

式中 β 为传播常数. 将(5)式整理可得 TE 模式标量赫姆霍兹方程

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + (k_0^2 n^2 - \beta^2) E_y = 0.\quad (6)$$

同理可得 TM 模式标量赫姆霍兹方程

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} + (k_0^2 n^2 - \beta^2) H_y = 0.\quad (7)$$

通过分析(6)与(7)数值解的形式, 便可较为简便的判定结构内模式分布的情况^[13-15].

作为对模式分析方法的验证, 本文同时采用时域有限差分方法^[16]计算了不同结构 LED 的光提取效率. 计算设置如图 1(a)所示. 文献已经证明^[17], LED 中电子空穴复合产生光子的模拟可以用点光源代替. 另外, 由于 LED 光源的非相干性和 FDTD 算法自身的特性, 本文选择了单个点偶极子源(图 1(a)中箭头所示)模拟 LED 有源层进行仿真. 这是因为在源区选择多个点偶极子源或者引入周期性边界条件都将不可避免地产生非物理特性的干涉模式, 导致计算结果失真. 本文在整个计算区域的侧面及上表面添加了完美匹配层(perfectly matched layer, PML), 用来吸收外来波和避免非电磁反射^[18,19], 同时在下底面引入完美导体层(PEC)来模拟实际 LED 结构中底部金属接触对能量的反射.

本文中 LED 的光提取效率 η_{extr} 按下式进行计算:

$$\eta_{\text{extr}} = \frac{P_{z,\text{out}}^+}{P_{x,\text{in}}^+ + P_{x,\text{in}}^- + P_{y,\text{in}}^+ + P_{y,\text{in}}^- + P_{z,\text{in}}^+ + P_{z,\text{in}}^-},\quad (8)$$

其中, $P_{z,\text{out}}^+$ 是 LED 顶端出光面(图 1(a)中阴影部分所示)法向功率积分值, 即 LED 顶端辐射功率. $P_{x,\text{in}}^+$, $P_{x,\text{in}}^-$, $P_{y,\text{in}}^+$, $P_{y,\text{in}}^-$, $P_{z,\text{in}}^+$ 和 $P_{z,\text{in}}^-$ 分别是包围点偶极子的立方体(图 1(a)中虚线框所示)的六个表面处向体外出射的功率的法向积分值. 另外, 考虑到 GaN 介质的折射率虚部在蓝光频段近似为零, 所以忽略 GaN 介质引起的功率损耗.

3 双光子晶体 GaN 蓝光 LED 结构优化

3.1 p-GaN 层光子晶体刻蚀深度优化

本文首先讨论了不考虑嵌入式光子晶体情况下, 在 p-GaN 层深度刻蚀光子晶体的 LED 结构. 首先可以确定的是, 在顶端刻蚀光子晶体后, 原有的全反射限制因素势必会被放宽^[20]. 从而造成 LED

光提取效率提升. 但从文献报道来看, 这种提升的效果并不显著. 为此, 我们首先计算了此种情况下未被刻蚀的 GaN 区域内 TE 模式分布情况, 其有效折射率 n_{eff} 随该 GaN 层厚度 $t(t = 2000 \text{ nm} - d)$ 的变化如图 2 所示. TM 模式的分布与之类似.

从图 2 可以看出, 当刻蚀深度较浅 ($d \leq 200 \text{ nm}$ 即 $t > 1.8 \mu\text{m}$) 时, 基模 ($m = 0$) 和一阶导模 ($m = 1$) 的有效折射率 n_{eff} 并未呈现显著变化, 远大于顶层光子晶体区域的等效折射率 ($n_{\text{PhCs}} \approx 2.0$). 同时大部分低阶导模均满足 $n_{\text{eff}} > n_{\text{PhCs}}$. 其携带的能量仅局限于 GaN 层中而不能与顶层光子晶体有效的耦合, 从而导致光提取效率较低 [21].

对于光子晶体刻蚀深度满足 $100 \text{ nm} \leq d \leq 600 \text{ nm}$ 的情况, 此时大部分高阶导模 ($n_{\text{eff}} < n_{\text{PhCs}}$) 仍未被截断, 这部分模式的能量可以通过顶部光子晶体向 LED 顶端散射, 但由于其携带能量较少 [21], 不会显著提高整个 LED 的光提取效率. 对于低阶导模 ($n_{\text{eff}} > n_{\text{PhCs}}$), 我们计算了其

在 LED 结构内的分布情况. 以不同刻蚀深度结构中有有效折射率最接近光子晶体等效折射率的低阶导模为例, 其分布情况如图 3 所示 (注: 其余低阶导模的分布也遵循和图 3 一致的情况).

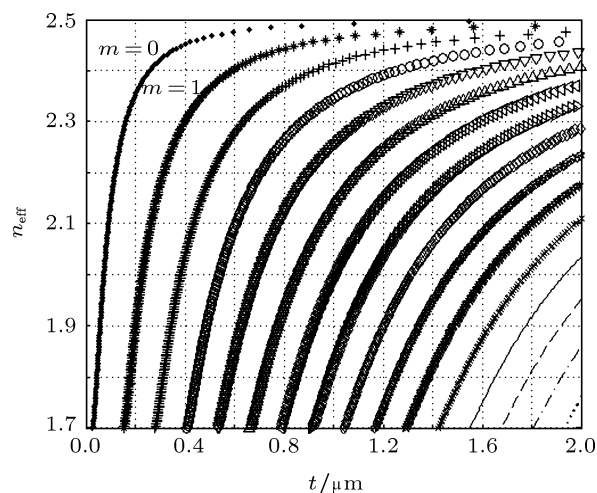


图 2 未刻蚀 GaN 层内导模的有效折射率 n_{eff} 随该层厚度 t 的变化情况

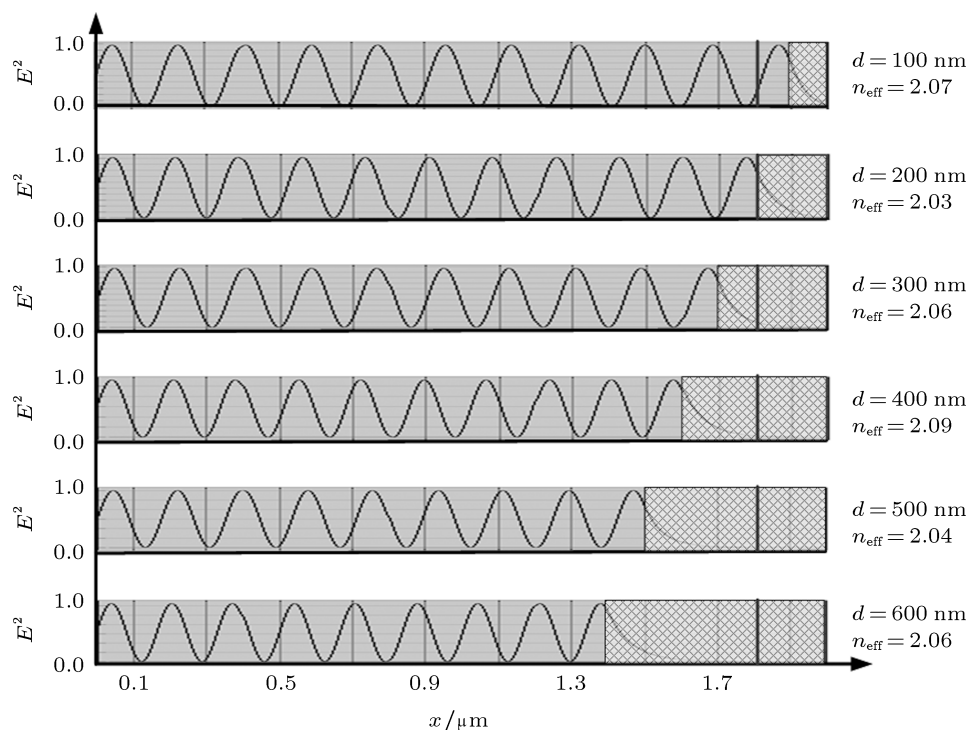


图 3 顶层光子晶体刻蚀不同深度情况下低阶导模分布图

从图 3 可以看出, 随着顶层光子晶体刻蚀深度的增加, 低阶导模的分布被逐步推向远离源区的更窄的空间. 比较 $d \leq 200 \text{ nm}$ 和 $d \geq 300 \text{ nm}$ 的情况

可以发现, 当顶层光子晶体刻透有源层后, 低阶导模的分布空间将与源区分离. 随着 d 逐渐增加, 这部分低阶导模从源区获得的能量逐渐减少, 这意味

着他们对光提取效率提升造成的限制越来越少. 由此可以判定, 顶部光子晶体刻蚀深度的优化范围应为 $200 \text{ nm} \leq d \leq 300 \text{ nm}$.

我们利用时域有限差分方法计算了顶层光子晶体刻蚀深度不同情况下 LED 光提取效率的变化情况, 如图 4 所示.

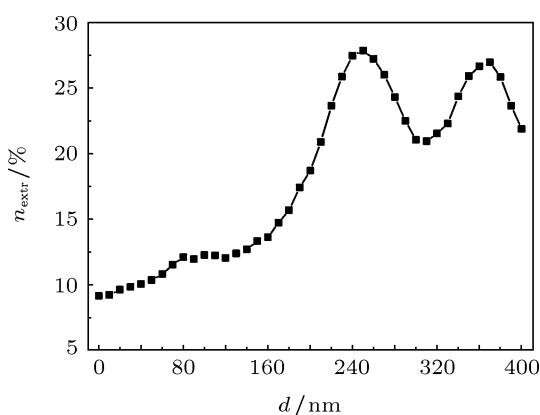


图 4 顶层光子晶体刻蚀深度变化对 LED 光提取效率的影响

从图中可以看出, 随着光子晶体刻蚀深度的增加, 光提取效率逐渐增加. 极大值出现在 $d = 250 \text{ nm}$ 处, 对应的光提取效率为 27.86%. 这与文献 [7] 的结论是一致的, 即当顶层光子晶体刻蚀深度在 $d \approx \lambda/n_{\text{PhCs}}$ 时 GaN 蓝光 LED 光提取效率将给出极大值.

当顶层光子晶体刻蚀深度进一步增加时, 从图 2 可以发现未刻蚀 GaN 内支持的导模数量逐渐减少. 以 $t = 2 \mu\text{m}$ 为例, 此时未刻蚀 GaN 层内支持 16 个不同的 TE 模式, 当未刻蚀 GaN 厚度减小到 $t = 1.4 \mu\text{m}$ 时, 仅支持 11 个不同的 TE 模式. 部分局限于 GaN 中的具有相对较小的有效折射率的高阶导模被截断, 这势必导致光提取效率不会始终呈现增长态势. 综合前面的分析可以判定, 随着高阶导模依次被截断, 光提取效率将呈现震荡状态 (如图 4 所示).

至此, 我们优化了含顶层光子晶体 GaN 蓝光 LED 中光子晶体的刻蚀深度. 分析表明, 当且仅当刻蚀深度满足 $d \approx \lambda/n_{\text{PhCs}}$ 时光提取效率具有极大值. 当 d 过小时, 源区的能量大部分转化为低阶导模局限在 GaN 区域内且不能被顶层光子晶体有效的提取; 而当 d 过大时, 高阶导模的截断将导致光提取效率出现震荡, 也不利于 LED 性能

的提升.

3.2 嵌入式光子晶体结构参数优化

这一部分的优化涉及两个参数, 即嵌入式光子晶体的厚度 T 和嵌入式光子晶体距离有源层的距离 D . 本文首先讨论嵌入式光子晶体层厚度 T 的影响. 此时嵌入式光子晶体距有源层的距离 D 为 200 nm .

3.2.1 嵌入式光子晶体的厚度 T 的优化

通过本文 3.1 部分的分析, 我们选取顶层光子晶体刻蚀深度为 250 nm , 此时 GaN 基蓝光 LED 具有较高的光提取效率. 诚然, 光子晶体穿透有源层将在一定程度上改变 LED 结构中的电流分布. 但已有文献证明 [22], 顶端深度刻蚀光子晶体并不会显著影响到原来 LED 的伏安特性. 同时, 本文所关心的是 LED 的光提取效率, 这与有源层发出的总能量是密切相关的. 图 5 给出了顶层光子晶体刻蚀深度不同时, 有源层发出的总能量的变化情况. 从图中可见, 当 $100 \text{ nm} \leq d \leq 200 \text{ nm}$ 时, 有源层发出的总能量急剧减少, 而此时顶层光子晶体并未穿透有源层, 当顶层光子晶体穿透有源层后, 有源层发出的总能量呈现上下浮动. 这说明, 顶层光子晶体的深度刻蚀并非引起有源层发出的总能量改变的主要原因.

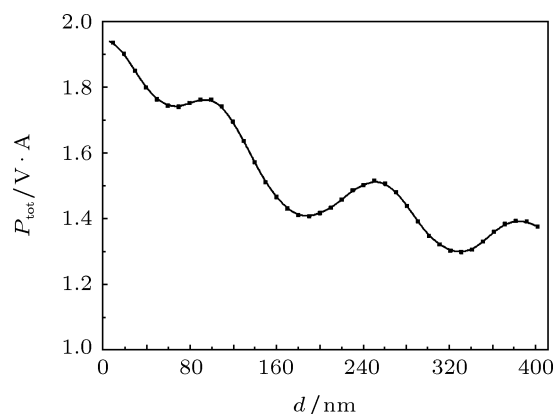


图 5 顶层光子晶体刻蚀深度变化对有源层辐射总能量的影响

另外需要强调的是, 本文 3.1 部分的优化虽然未考虑嵌入式光子晶体的存在, 但对于顶端深度刻蚀光子晶体的情况, 嵌入式光子晶体的引入不会显著改变原 3.1 分析中对应的高低阶导模的分布, 故本文 3.1 的优化结果是可信的. 本文随后的 FDTD

计算将给出这部分的论证.

图 6 给出了嵌入式光子晶体厚度分别为 50 nm, 100 nm, 200 nm 和 300 nm 时对应的 LED 结构中局限在 GaN 层中的低阶导模的变化情况. 从图 6 中可以看出, 随着 T 的增加, GaN 层中的低阶导模分布形式并未发生显著改变. 相对折射率较大的零阶, 一阶导模仍局限在 GaN 层内, 其能量仍未与顶层光

子晶体发生很好的耦合. 但需要注意的是, 随着 T 的增加, 低阶导模被局限在厚度逐渐减小的 GaN 层中, 如图 6(c), (d) 所示. 考虑到引入嵌入式光子晶体后, 光提取效率得到了进一步增强 [7,8], 依照文献 [7] 的结果, 我们进一步计算了嵌入式光子晶体的引入后在 LED 结构中激发的 CLM 的分布情况, 如图 7 所示.

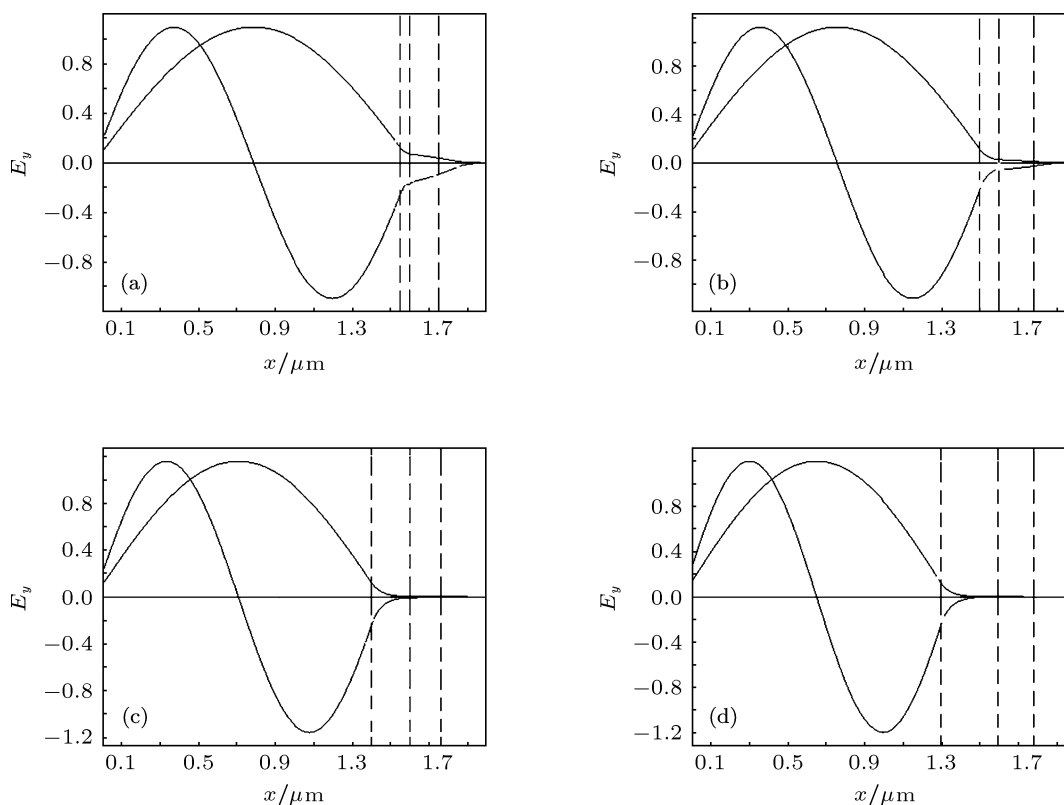


图 6 嵌入式光子晶体不同厚度时 LED 结构内低阶导模分布情况 (结构中光子晶体与 GaN 界面在图中以划线标识) (a) $T = 50$ nm; (b) $T = 100$ nm; (c) $T = 200$ nm; (d) $T = 300$ nm

从图 7 中可以看出, 在 $1.6 \mu\text{m} \leq x \leq 1.8 \mu\text{m}$ 区域生成了新的导模, 此即 CLM. 当嵌入式光子晶体厚度较薄时, CLM 的一部分能量将穿透嵌入式光子晶体区域向 GaN 层渗透, 使得局限在覆盖层和向顶层光子晶体耦合的能量减少, 从而导致光提取效率下降. 比较图 7(a) 和 (b) 可以发现, 嵌入式光子晶体厚度越薄, CLM 穿透嵌入式光子晶体向 GaN 层泄漏的能量越多, 从而可以推断当嵌入式光子晶体厚度很薄时, LED 光提取效率提升将会很不明显.

此外, CLM 的振幅随着嵌入式光子晶体厚度的增加而逐渐增加, 但当 $T \geq 200$ nm 时, 比较图 7(c)

和 (d), CLM 的振幅趋于定值, 图 7(c) 和 (d) 中布洛赫模式的分布几乎相同, 故这两种结构的光提取效率相差不大, 此时可以判断在 $T \geq 200$ nm 时, 增加嵌入式光子晶体厚度难以进一步引起 LED 光提取效率的提升. 比较图 7(b) 和 (d), 虽然 $T = 300$ nm 时 CLM 的振幅更大, 但是此时布洛赫模式的能量更多地集中于嵌入式光子晶体, 而不是向顶层光子晶体渗透, 故 $T = 300$ nm 时的 LED 光提取效率不会明显优于 $T = 100$ nm 的提取效率.

综合以上的分析可以进一步判断, $T \geq 100$ nm 时, LED 光提取效率的提升不会产生显著的改变. 故本文给出在顶端 p-GaN 刻蚀厚度 $d = 250$ nm

光子晶体,并在距离有源层下部 $D = 200 \text{ nm}$ 处引入嵌入式光子晶体层的 GaN 基蓝光 LED 结构中,嵌入式光子晶体厚度优化范围为 $100 \text{ nm} \leq T \leq 300 \text{ nm}$. 我们通过 FDTD 方法计算了嵌入式

光子晶体厚度变化情况下不同 GaN 蓝光 LED 的光提取效率,作为比较,当顶层光子晶体刻蚀深度 $d = 150 \text{ nm}$ 的对应情况也进行了计算. 相关结果如图 8 所示.

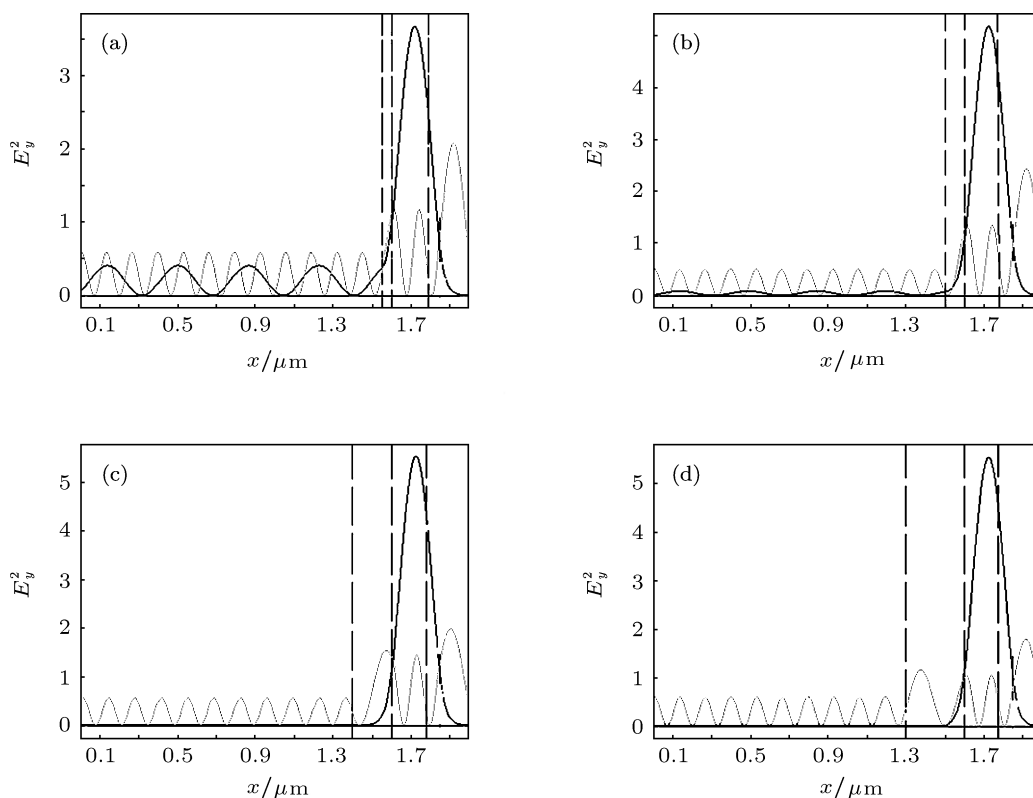


图 7 嵌入式光子晶体不同厚度时 LED 结构内 CLM 和布洛赫模式幅度分布情况 (图中黑线表示 CLM, 灰线为布洛赫模式. 结构中光子晶体与 GaN 界面在图中以划线标识) (a) $T = 50 \text{ nm}$; (b) $T = 100 \text{ nm}$; (c) $T = 200 \text{ nm}$; (d) $T = 300 \text{ nm}$

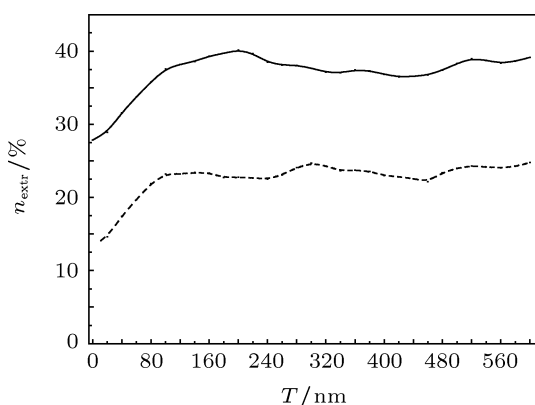


图 8 嵌入式光子晶体的厚度 T 对 LED 光提取效率的影响

从图 8 中可以看出,随着嵌入式光子晶体厚度的变化,顶层光子晶体的刻蚀深度为 250 nm 时的光提取效率变化趋势与刻蚀深度为 150 nm 时光提

取效率变化趋势基本一致. 也就是说,本论文先对顶层光子晶体进行参数优化进而优化嵌入式光子晶体结构是合理的. 同时我们注意到,对于任意的嵌入式光子晶体刻蚀深度 T , $d = 250 \text{ nm}$ 光提取效率均优于 $d = 150 \text{ nm}$ 光提取效率. 这与本文 3.1 部分的分析是完全一致的.

此外,从图 8 中可以看出,随着嵌入式光子晶体的使用,LED 的光提取效率得到了进一步的增加,当 $d = 250 \text{ nm}$, $T = 200 \text{ nm}$ 时,光提取效率有最大值 40.18% . 需要注意的是,对于顶层光子晶体厚度不同的两类结构,当 $T > 100 \text{ nm}$ 时,其光提取效率随着刻蚀深度的增加均呈小幅振荡状态,此时 T 的变化对提取效率影响不大.

在接下来的分析中,我们选取嵌入式光子晶体厚度 $T = 300 \text{ nm}$,进一步对嵌入式光子晶体离有源

层的位置 D 进行优化.

3.2.2 嵌入式光子晶体距有源层距离 D 的优化

图 9 给出了 D 取不同值情况下 LED 结构内 CLM 的分布情况. 从图中可以看出, 当嵌入式光子晶体距离有源层较近时, CLM 集聚了较强的辐射能量, 且其大部分集中在靠近有源层的区域, 如图 9(a), (b) 所示. 随着 D 的逐渐增加, CLM 的峰值

减小, 且逐渐远离有源层, 如图 9(c)—(f) 所示. 值得注意的是, 随着 D 的逐渐增加, CLM 的相对折射率也逐渐变大. 这都使得 CLM 与顶层光子晶体耦合的效果逐渐变差, 从而导致 LED 光提取效率逐渐下降. 进一步比较图 9(a) 与 (b) 发现, 当嵌入式光子晶体靠有源层过近时, 生成的 CLM 将有一部分能量穿过嵌入式光子晶体向靠近衬底部分的 GaN 层渗透. 从而不可避免的削弱了该模式与顶层光子晶体的耦合, 导致 LED 光提取效率下降.

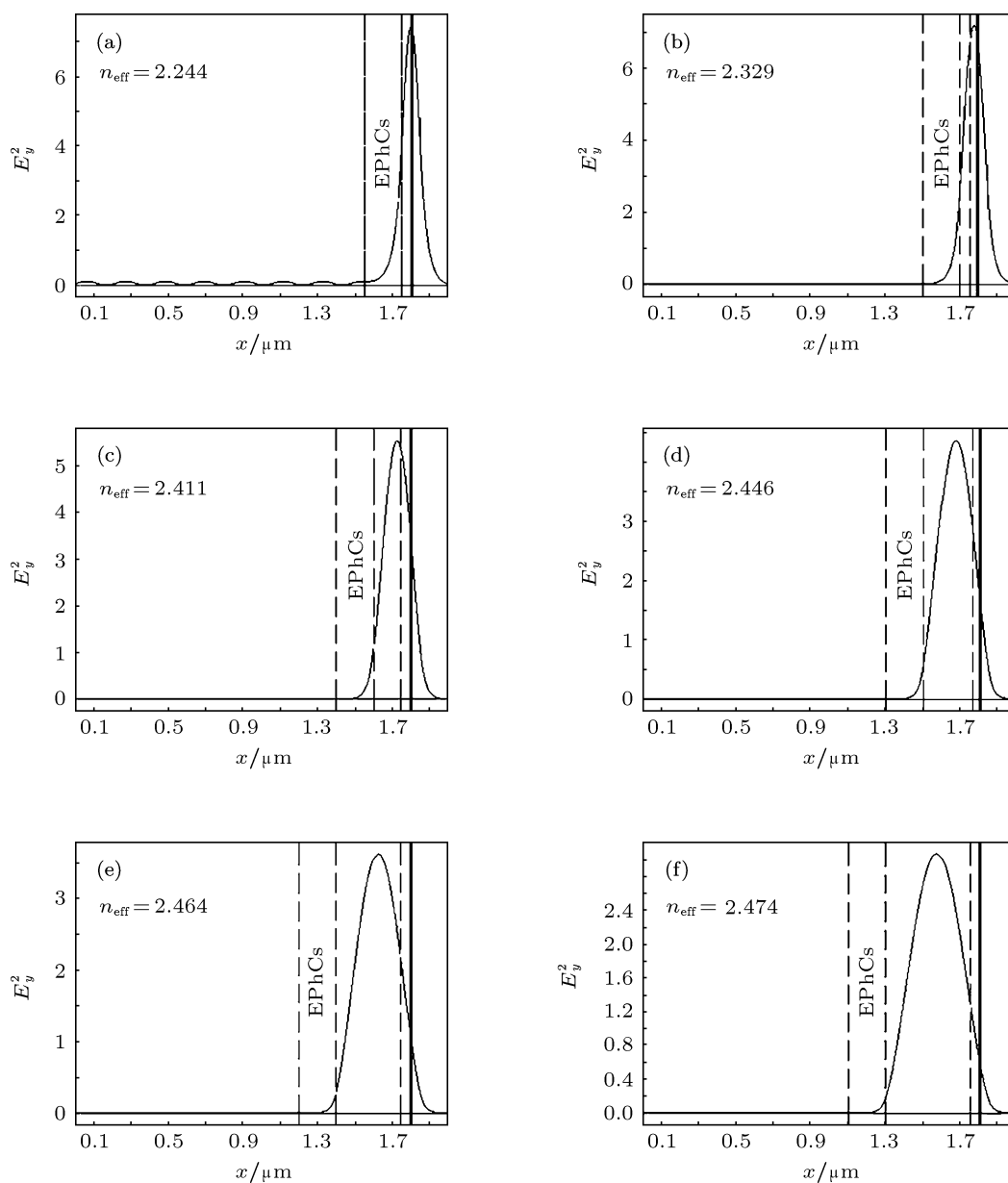


图 9 嵌入式光子晶体距有源层距离 D 不同时 LED 结构内 CLM 分布变化情况 (LED 结构中有源层位置用黑实线标出, 划线标记 GaN 与光子晶体的界面位置) (a) $D = 50$ nm; (b) $D = 100$ nm; (c) $D = 200$ nm; (d) $D = 300$ nm; (e) $D = 400$ nm; (f) $D = 500$ nm

综合以上的分析,我们可以判定,当 $D = 50 \text{ nm}$ 时,由于 CLM 会穿透嵌入式光子晶体向靠近衬底的 GaN 区域渗透,故此时的 LED 光提取效率应小于 $D = 100 \text{ nm}$ 时的情况;当 $D \geq 200 \text{ nm}$ 时,由于 CLM 的分布远离源区且相对折射率变大导致与顶层光子晶体的耦合变弱,光提取效率必然下降.至此可以判定嵌入式光子晶体距有源层距离的优化范围为 $100 \text{ nm} \leq D \leq 200 \text{ nm}$.

图 10 给出了利用 FDTD 计算的顶层光子晶体的刻蚀深度为 250 nm 时嵌入式光子晶体距有源层距离 D 对 LED 光提取效率的影响.图中点线、划线和实线分别表示 $T = 100 \text{ nm}$, $T = 200 \text{ nm}$ 和 $T = 300 \text{ nm}$ 的情况.

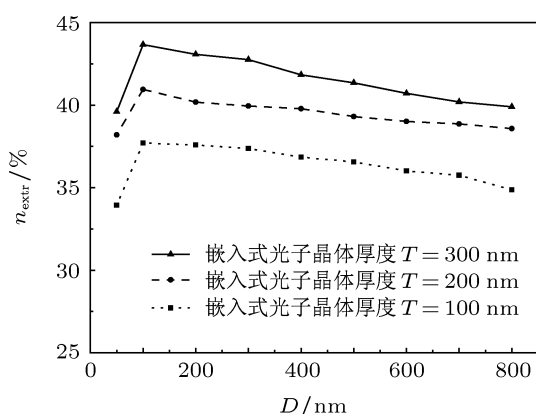


图 10 嵌入式光子晶体距有源层距离 D 对 LED 光提取效率的影响

从图 10 中可以看出,随着 D 的增加,光提取效率先是显著上升随后缓慢下降.对于图中所示的三类 LED,光提取效率的峰值均出现在 $100 \text{ nm} \leq D \leq 200 \text{ nm}$ 范围内.这与本文通过模

式分析得出的优化范围是一致的.

值得注意的是当 $d = 250 \text{ nm}$, $T = 300 \text{ nm}$ 且 $D = 100 \text{ nm}$ 时,我们得到 LED 的光提取效率为 43.66%,相比普通 GaN 蓝光 LED 9.16% 的光提取效率,获得了 4 倍的增强.这充分说明本文的结构优化是有效的.

4 结论

本文采用光子晶体等效折射率近似的方法对具有双层光子晶体结构的 GaN 蓝光 LED 仿真模型进行了简化.简化后的 LED 仿真模型可以运用简单的模式分析进行结构参数优化,从而有效地避免了原数值计算方法对该结构优化所需的复杂建模仿真,极大的减少了运算时间和运算复杂度.本文给出了不同结构参数下 LED 内不同模式分布的改变情况,并详细讨论了不同的结构参数引起的模式分布改变进而对 LED 光提取效率的影响,为双光子晶体 GaN 蓝光 LED 结构参数优化以提升光提取效率给出了明确的理论指导.

最终通过模式分析及参数优化,我们得到了具有双层三角晶格空气孔隙光子晶体的 GaN 蓝光 LED 模型,其各部分参数优化范围为:光子晶体晶格常数 $a = 200 \text{ nm}$,孔隙半径 $R = 60 \text{ nm}$,顶层光子晶体刻蚀深度 $d \approx \lambda/n_{\text{PhC}}$,嵌入式光子晶体厚度范围 $100 \text{ nm} \leq T \leq 300 \text{ nm}$,其距离有源层的距离 $100 \text{ nm} \leq D \leq 200 \text{ nm}$.同时,我们通过时域有限差分方法验证了本文的优化设置.计算结果阐明,优化后的双层光子晶体 GaN 蓝光 LED 的光提取效率获得了 4 倍的提升,从而对高性能 GaN 基蓝光 LED 的设计制造提供了重要的理论参考价值.

- [1] Schubert E F 2006 *Light Emitting Diodes* (Cambridge: Cambridge Univ. Press) p21
- [2] Schubert E F, Kim J K 2005 *Science* **308** 1274
- [3] Fujii T, Gao Y, Sharma R, Hu E L, Denbaars S P, Nakamura S 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 855
- [4] Xing Y H, Han J, Deng J, Li J J, Xu C, Shen G D 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1233 (in Chinese) [荆艳辉, 韩军, 邓军, 李建军, 徐晨, 沈光地 2010 物理学报 **59** 1233]
- [5] Ma X Y 2010 *The Theory and Its Application of The Photonic Crystal* (Beijing: Science Press) p22 (in Chinese) [马锡英 2010 光子晶体原理及应用 (北京: 科学出版社) 第 22 页]
- [6] Chen J, Li X L, Li H H, Wang Q K 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6126 (in Chinese) [陈健, 李小丽, 李海华, 王庆康 2009 物理学报 **58** 6126]
- [7] Matioli E N 2010 *PhD Thesis* (University of California at Santa Barbara)
- [8] David A, Moran B, McGroddy K, Matioli E, Hu E L, DenBaars S P, Nakamura S, Weisbuch C 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 113514
- [9] Liu S B, Zhu C X, Yuan N C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2804 (in Chinese) [刘少斌, 朱传喜, 袁乃昌 2005 物理学报 **54** 2804]
- [10] Zhang Y Y, Fan G H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 078504 (in Chinese) [张运炎, 范广涵 2011 物理学报 **60** 078504]

- [11] Long D H, Hwang I K, Ryu S W 2009 *IEEE. J. Sel. Top. Quantum Electron* **15** 1257
- [12] Vardeny Z V, Nahata A 2011 *Nat. Photonics* **5** 453
- [13] Marcuse D 1982 *Theory of dielectric optical waveguides* Liu Hongdu Transl. (Beijing: Posts & Telecom Press) p7-14 (in Chinese) [D. 马库塞 1982 介质光波导理论刘弘度译 (北京: 人民邮电出版社) 第 7-14 页]
- [14] Yariv A, Yeh P 2009 *Photonics-Optical Electronics in Modern Communications* Chen heming Transl. (Beijing: Publishing House of Electronics Industry) p98-112 (in Chinese) [亚里夫, 耶赫 2009 光子学——现代通信光电子学陈鹤鸣译 (北京: 电子工业出版社) 第 98-112 页]
- [15] Qin Z K, Ma C S 2011 *A Concise Course on Optical Waveguides* (Beijing: Higher Education Press) p54-59 (in Chinese) [秦政坤, 马春生 2011 光波导简明教程 (北京: 高等教育出版社) 第 54-59 页]
- [16] Ge D B, Yan Y B 2005 *The Finite-difference time-domain Method of the Electromagnetic Wave* (Xi'an: Xidian University Press) p11-34 (in Chinese) [葛德彪, 闫玉波 2005 电磁波时域有限差分方法 (西安: 西安电子科技大学出版社) 第 11-34 页]
- [17] Wiesmann C 2009 *PhD Thesis* (Regensburg Universität)
- [18] Berenger J P 1994 *Comput. Phys.* **114** 185
- [19] Zhang B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5677 (in Chinese) [张波 2005 物理学报 **54** 5677]
- [20] Chen J, Wang Q K, Li H H 2010 *Acta Opt. Sin.* **30** 233 (in Chinese) [陈健, 王庆康, 李海华 2010 光学学报 **30** 233]
- [21] David. A, Fujii T, Sharma R, McGroddy K, Nakamura S, Den-Baars S P, Hu E L, Weisbuch C, Benisty H 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 061124
- [22] Chul S Y, Ho K D, Hong K E, Mok P J, Ming H K, Constant K, Ho C J, Park Q H, Youl R H, Hyeob B J, Tak J, Tae K 2010 *IEEE. J. Sel. Top. Quantum Electron* **46** 116

Structural optimization of GaN blue light LED with double layers of photonic crystals*

Gao Hui¹⁾ Kong Fan-Min¹⁾ Li Kang^{1)†} Chen Xin-Lian¹⁾²⁾

Ding Qing-An¹⁾ Sun Jing¹⁾

1) (School of Information Science and Engineering, Shandong University, Jinan 250100, China)

2) (School of Physics, University of Jinan, Jinan 250022, China)

(Received 5 September 2011; revised manuscript received 11 October 2011)

Abstract

The GaN-based blue light LED with double layer photonic crystals is designed to enhance the vertical light extraction efficiency. The effective index approximation method is proposed and used to solve the distribution of the modes in the LED model. The geometrical parameters including the depth of the top photonic crystal d , the thickness of the embedded photonic crystal T , and the distance between the active layer and the embedded photonic crystal D are optimized. Compared with other numerical optimization, the mode analysis used in this work can dramatically save computation time and reduce complexity. In addition, it can provide more theoretical details about the influence of these geometrical parameters on light extraction efficiency. It can be found that when the surface photonic crystal satisfies the condition of $d \approx \lambda/n_{\text{PhCs}}$, high order modes localized in the structure are still not cut off but the low order modes obtain less power since they are pushed away from the active layer. Hence, the light extraction efficiency reaches its maximum. The cap layer modes can be excited by the embedded photonic crystals, when this layer satisfies $100 \text{ nm} \leq T \leq 300 \text{ nm}$ and $100 \text{ nm} \leq D \leq 200 \text{ nm}$, the cap layer modes gather much power from the active layer and interact with the surface photonic crystals more efficiently. Hence the light extraction efficiency is dramatically improved. With our optimized parameters, the light extraction efficiency can be achieved to be up 4 times that of ordinary LED. These results shows a significant promise of designing a high-efficiency GaN-based blue light LED.

Keywords: light emitting diode, photonic crystal, mode analysis, finite-difference time-domain

PACS: 78.66.Fd, 78.60.Fi, 78.20.Bh, 52.35.Mw

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant Nos. 2009CB930503, 2009CB930501), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61077043).

† E-mail: kangli@sdu.edu.cn