

二维光子晶体提高 C 波段 LED 出光效率的研究

魏可嘉¹, 李鸿强^{1*}, 陈弘达², 李恩邦^{1,3}, 柳智慧¹

1. 天津工业大学电子与信息工程学院, 天津 300387
2. 中国科学院半导体研究所, 北京 100083
3. Centre for Ultrahigh Bandwidth Devices for Optical Systems, The University of Sydney, New South Wales 2006

摘要 片上集成光源是未来光电子系统中光源发展的主要趋势, LED 光源作为片上集成光源的主要缺点是其出光效率低, 二维光子晶体是提高 LED 出光效率的有效手段。本工作设计了 C 波段 LED 的基本结构及参数, 并采用时域有限差分法计算了不同阵列不同占空比的二维光子晶体能带结构, 利用禁带理论选取提高 C 波段 LED 出光效率的最优二维光子晶体结构参数, 结果表明三角排列空气孔二维光子晶体晶格常数 $a=500\text{ nm}$ 且占空比 $R_p=0.44$ 的光子晶体结构最优。

关键词 光子晶体; 时域有限差分法; 能带; LED

中图分类号: O431 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2012)09-2341-06

引言

目前由于传统的光纤光栅解调系统用光源体积较大、价格昂贵, 限制了其推广应用领域, 制作出光纤光栅解调系统用片上集成光源就显得格外重要。虽然目前已经有一些单片集成硅基光源的成果报道^[1,2], 但是在短期内真正实现高效的单片集成硅基光源仍具有挑战性。目前集成光源采用的方式有外部光源和混合集成的片上光源两种^[3]。发光二极管 (light-emitting diodes, LED) 作为片上集成光源选择之一, 具有其独特的优势, 包括: 低成本、低功耗、体积小、寿命长及可靠性高。但 LED 作为片上集成光源主要缺点是其出光效率低, 这是由于 LED 有源层的半导体材料比空气的折射率高, 光在 LED 介质与空气的界面发生全反射, 使得大部分光不能从 LED 中发射出来, 被金属触点、基底或有源层吸收, 导致 LED 的出光效率低^[4-6], 如何提高 LED 的出光效率便成为人们研究的热点问题。

提高 LED 出光效率的方法很多, 比如生长分布布拉格反射层结构^[7]、表面粗糙化^[8]、制作透明衬底^[9]以及倒装焊^[10]。布拉格反射层由多层高折射率和低折射率材料组成, 折射率差越大, DBR 反射率就越高, 从而减少衬底的光吸收, 提高 LED 出光效率; 表面粗糙化是通过增加透射率, 将

满足全反射定律的光改变方向, 继而在另一个表面被反射回来时不被全反射而透过界面, 达到提高光出射的目的; 制作透明衬底是通过减少衬底对光的吸收, 提高光出射; 倒装焊结构可以减少光在 LED 内部反射而造成的有源层及自由载流子对光的吸收, 增加光出射。这些方法对 LED 出光效率都有不同程度的提高, 但是效果都不够理想。

自 1987 年 Yablonovitch 提出光子晶体 (photonic crystal, PC) 以来^[11], 光子晶体就引起了研究人员的兴趣。由于二维光子晶体是由介电常数不同的介质呈周期性排列而成, 它具有类似于半导体禁带的光子带隙。光子带隙限制了水平方向上的光场传播, 提高了垂直方向上的光出射, 达到提高 LED 出光效率的目的。利用光子晶体提高 LED 出光效率的研究国内外均有报道, 国外 Taesung Kim 研究小组研究了红外 LED^[12], 在其表面加入光子晶体后, 提高 LED 出光效率 75%; 国内半导体研究小组采用电子束曝光和感应耦合等离子技术在 InP 基 LED 表面制作光子晶体^[13], LED 出光效率最大提高了 93%。但均未对光子晶体能带结构进行系统分析, 寻找提高 LED 出光效率最优的光子晶体结构。

本文设计了课题组研究的集成微系统中片上光源 C 波段 LED 的基本结构, 并对其结构进行了模拟仿真, 得到了 C 波段 LED 的光谱特性曲线及输出光功率曲线。采用时域有限差分 (finite-difference time-domain, FDTD) 法计算了不同

收稿日期: 2012-03-31, 修订日期: 2012-07-20

基金项目: 国家自然科学基金项目(61177078, 60977059, 60877049); 高等学校博士学科点专项科研基金项目(20101201120001)资助

作者简介: 魏可嘉, 1988 年生, 天津工业大学电子与信息工程学院硕士研究生 e-mail: weikejiaaa1988@163.com

* 通讯联系人 e-mail: lihongqiang@tjpu.edu.cn

阵列不同占空比($R_p = r/a$, r 为光子晶体晶胞半径, a 为光子晶体晶格常数)的二维光子晶体能带结构, 分析了光子晶体禁带宽度与占空比 R_p 的关系。利用禁带理论找出最佳 R_p 和归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$, 从而得到了用于提高 C 波段 LED 出光效率最优的光子晶体结构参数。

1 C 波段 LED 基本结构参数

设计的 C 波段 LED 基本结构如图 1 所示, 它是在 n -InP 衬底上连续生长 4 层, 依次为: n -InP 缓冲层、InGaAsP 有源层、 p -InP 限制层和 p -InGaAsP 顶层。



Fig. 1 Basic structure of C-band LED

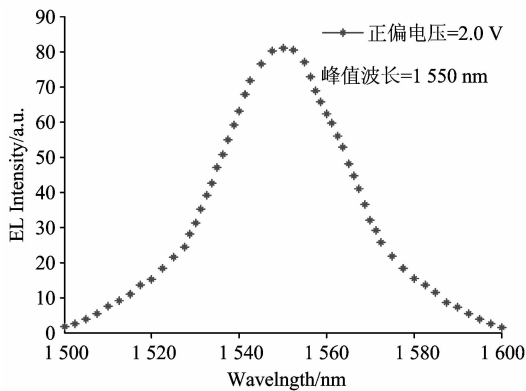


Fig. 2 Output spectrum of LED

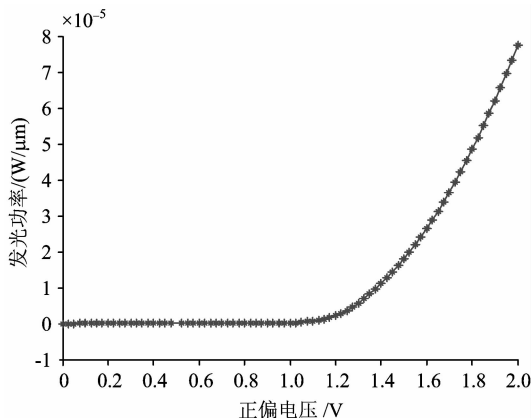


Fig. 3 Output luminous power of LED

利用 Silvaco 软件对 C 波段 LED 结构进行二维模拟仿真, 模拟时定义了 $4 \mu\text{m} \times 4 \mu\text{m}$ 大小的结构, 求解得到 LED 光谱曲线如图 2 所示。图 2 中, 当正偏电压为 2 V 时, LED 输出光谱的峰值波长为 1550 nm, 光谱宽度为 100 nm。在求解 LED 输出光功率时需要定义一个波长, 仿真时定义波长值为 1550 nm, 得到了 LED 的输出光功率曲线如图 3 所示。图 3 中, 当正偏电压大于 1.2 V 时器件发光, 且正偏电压为 2 V 时, LED 器件发光功率可达 $0.08 \text{ mW} \cdot \mu\text{m}^{-1}$ 。

2 FDTD 理论计算方法

时域有限差分法 FDTD 是求解电磁场 Maxwell 方程组的通用方法^[14]。具体原理是: 将 Maxwell 微分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。

Yee 氏网格中, 每一个磁场分量由四个电场分量环绕; 同样, 每一个电场分量由四个磁场分量环绕。此外, 电场和磁场在时间顺序上交替抽样, 抽样时间间隔彼此相差半个时间步, 使得 Maxwell 方程组离散以后构成显示差分方程, 从而在时间上迭代求解。

以直角坐标系中的三维 FDTD 迭代公式为例, 见式

$$E_x^{n+1}(i+1/2, j, k) = CA(m)E_x^n(i+1/2, j, k) + CA(m) \cdot \left[\frac{H_z^{n+1/2}(i+1/2, j+1/2, k) - H_z^{n+1/2}(i+1/2, j-1/2, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i+1/2, k+1/2) - H_y^{n+1/2}(i+1/2, k-1/2)}{\Delta z} \right]$$

式中

$$CA(m) = \frac{1 - \frac{\sigma(i+1/2, j, k)\Delta t}{2\epsilon(i+1/2, j, k)}}{1 + \frac{\sigma(i+1/2, j, k)\Delta t}{2\epsilon(i+1/2, j, k)}}$$

$$CB(m) = \frac{\frac{\Delta t}{\epsilon(i+1/2, j, k)}}{1 + \frac{\sigma(i+1/2, j, k)\Delta t}{2\epsilon(i+1/2, j, k)}}$$

$E_x^{n+1}(i+1/2, j, k)$ 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。 $\epsilon(i+1/2, j, k)$ 为 $(i+1/2, j, k)$ 处的介电常数, $\sigma(i+1/2, j, k)$ 为 $(i+1/2, j, k)$ 处的介质电导率, Δy 和 Δz 为相邻格点在 y 和 z 方向的步长间距。根据 FDTD 差分方程即可求解电磁场分布, 得到光子晶体能带结构。

3 光子晶体能带理论分析

计算求解了不同结构光子晶体的能带结构, 分别为: 正方排列空气孔二维光子晶体、正方排列介质柱二维光子晶体、三角排列空气孔二维光子晶体以及三角排列介质柱二维光子晶体。在能带求解过程中发现, 正方排列空气孔光子晶体结构无论是 E 偏振还是 H 偏振均不存在带隙, 因此本文

只讨论其他三种光子晶体的能带结构。

3.1 正方排列介质柱二维光子晶体能带分析

正方排列二维光子晶体的结构如图 4 所示, 图中 a 为光子晶体的晶格常数, r 为晶胞半径, 占空比 $R_p=r/a$ 。

本文研究利用二维光子晶体提高 C 波段 LED 出光效率, 因此主要求解 $a=500\text{ nm}$ 时光子晶体不同占空比对带隙的影响。计算求解了 R_p 为 $0.05\sim 0.5$ 时光子晶体能带结构, 发现当 $R_p<0.1$ 或 $R_p>0.4$ 时带隙不存在, 图 5—图 9 为 $R_p=0.15\sim 0.35$ 时光子晶体的能带结构。

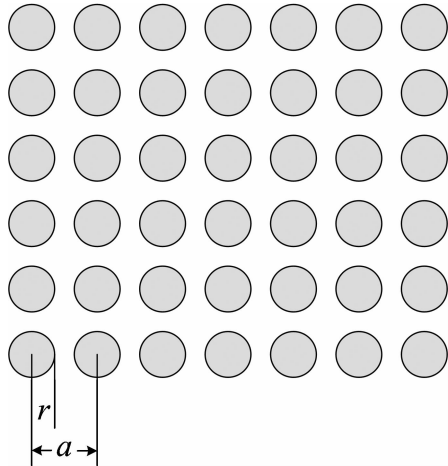


Fig. 4 Vertical view of the PC with square arrangement

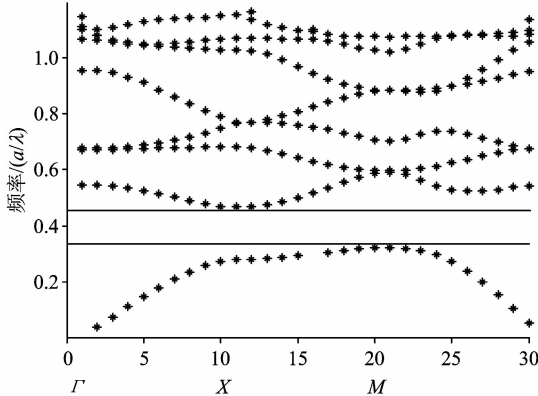


Fig. 5 Band structure of medium cylinder PC with square arrangement when $R_p=0.15$

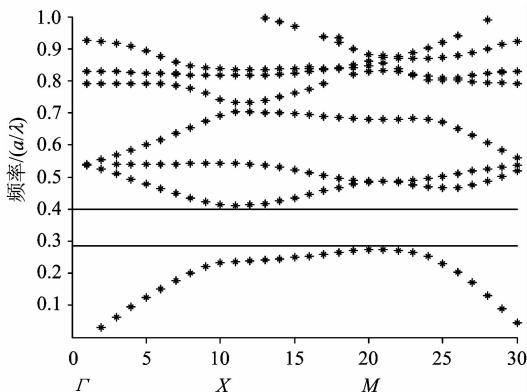


Fig. 6 Band structure of medium cylinder PC with square arrangement when $R_p=0.2$

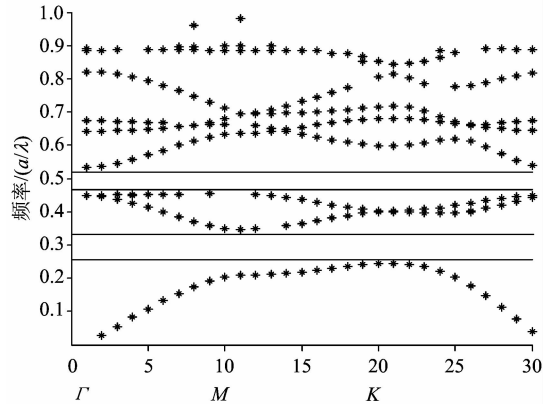


Fig. 7 Band structure of medium cylinder PC with square arrangement when $R_p=0.25$

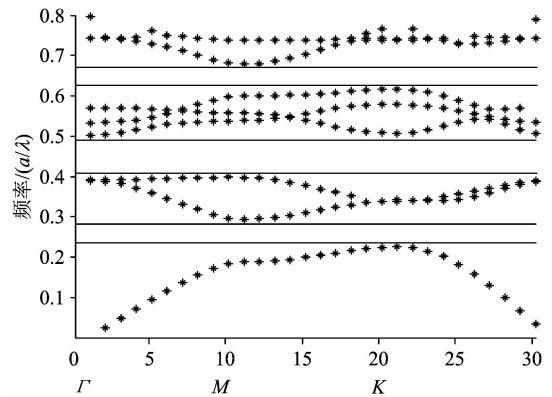


Fig. 8 Band structure of medium cylinder PC with square arrangement when $R_p=0.3$

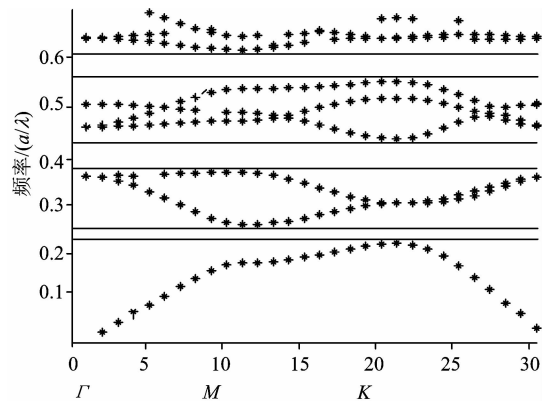


Fig. 9 Band structure of medium cylinder PC with square arrangement when $R_p=0.35$

正方排列介质柱光子晶体在 $R_p=0.15$ 时的能带结构如图 5 所示, 图 5 结果表明: 有一个 TM 偏振带隙, 归一化频率范围为 $0.3208\sim 0.4667(a/\lambda)$, 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 为 0.3937 , 带隙宽度为 0.1459 , 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围为 $1071\sim 1558\text{ nm}$, 中心波长为 1270 nm 。

正方排列介质柱光子晶体在 $R_p=0.2$ 时的能带结构如

图 6 所示, 图 6 结果表明: 有一个 TM 偏振带隙, 归一化频率范围为 $0.2738 \sim 0.4108(a/\lambda)$, 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 为 0.3423 , 带隙宽度为 0.1370 , 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围为 $1217 \sim 1826$ nm, 中心波长为 1461 nm。

正方排列介质柱光子晶体在 $R_p = 0.25$ 时的能带结构如图 7 所示, 图 7 结果表明: 有两个 TM 偏振带隙, 归一化频率范围分别为 $0.2439 \sim 0.3478$ 和 $0.4507 \sim 0.5337(a/\lambda)$, 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.2959 和 0.4922 , 带隙宽度分别为 0.1039 和 0.0830 , 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围分别为 $1437 \sim 2050$ nm 和 $937 \sim 1109$ nm, 中心波长分别为 1689 和 1015 nm。

正方排列介质柱光子晶体在 $R_p = 0.3$ 时的能带结构如图 8 所示, 图 8 结果表明: 有三个 TM 偏振带隙, 归一化频率范围分别为 $0.2249 \sim 0.2938$, $0.3978 \sim 0.5017$, $0.6156 \sim 0.6796(a/\lambda)$, 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.2594 , 0.4498 , 0.6476 , 带隙宽度分别为 0.0689 , 0.1039 , 0.0640 , 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围分别为 $1701 \sim 2223$ nm, $997 \sim 1256$ nm, $735 \sim 812$ nm, 中心波长分别为 1927 , 1112 , 772 nm。

正方排列介质柱光子晶体在 $R_p = 0.35$ 时的能带结构如图 9 所示, 图 9 结果表明: 有三个 TM 偏振带隙, 归一化频率范围分别为 $0.2129 \sim 0.2519$, $0.3608 \sim 0.4327$, $0.5497 \sim 0.6156(a/\lambda)$, 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.2324 , 0.3968 , 0.5827 , 带隙宽度分别为 0.0390 , 0.0719 , 0.0659 , 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围分别为 $1984 \sim 2348$ nm, $1155 \sim 1385$ nm, $812 \sim 909$ nm, 中心波长分别为 2151 , 1260 , 858 nm。

由上述结果分析可知, 用于提高 C 波段 LED 出光效率的正方排列介质柱二维光子晶体最优能带结构为图 6 所示, 此时 $R_p = 0.2$ 。

3.2 三角排列空气孔二维光子晶体能带分析

三角排列光子晶体结构如图 10 所示。本文计算了 R_p 为 $0.05 \sim 0.5$ 时三角排列空气孔光子晶体能带结构, 根据禁带理论得到三角排列空气孔二维光子晶体最优能带结构如图 11 所示, 此时 $R_p = 0.44$ 。

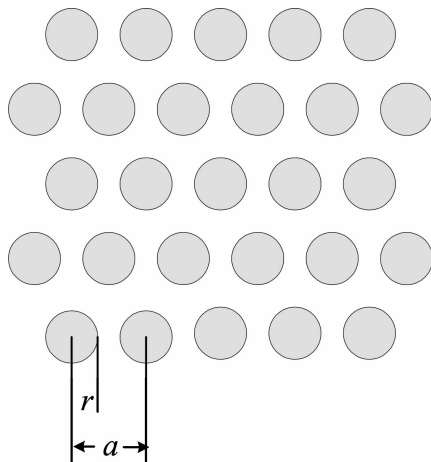


Fig. 10 Vertical view of the PC with triangular arrangement

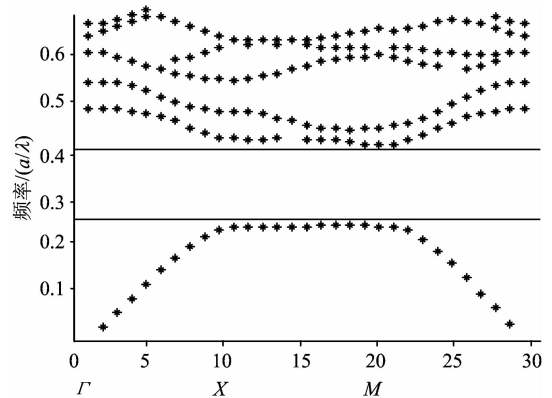


Fig. 11 Band structure of air hole PC with triangular arrangement when $R_p = 0.44$

能带结构存在一个 TE 偏振带隙, 归一化频率范围为 $0.2448 \sim 0.4147(a/\lambda)$, 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 为 0.3298 , 带隙宽度为 0.1699 , 由于光子晶体晶格常数 $a = 500$ nm, 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围为 $1205 \sim 2042$ nm, 中心波长为 1516 nm, 因此用于提高 C 波段 LED 出光效率最优。

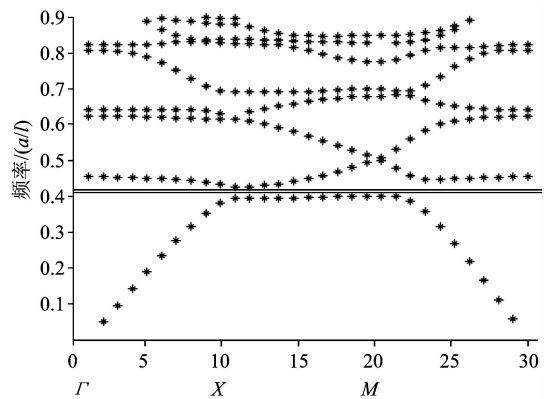


Fig. 12(a) Band structure of medium cylinder PC with triangular arrangement when $R_p = 0.25$ (TE mode)

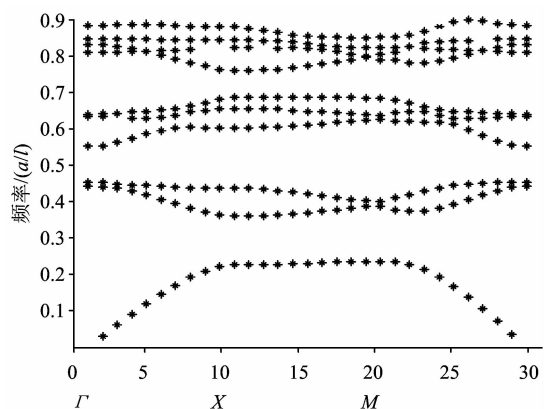


Fig. 12(b) Band structure of medium cylinder PC with triangular arrangement when $R_p = 0.25$ (TM mode)

3.3 三角排列介质柱二维光子晶体能带分析

对于三角排列介质柱二维光子晶体, 计算了 R_p 为 0.05 ~ 0.5 时光子晶体能带结构, 根据禁带理论得到三角排列介质柱二维光子晶体最优能带结构如图 12 所示, 此时 $R_p = 0.25$, 有三个 TM 偏振带隙, 一个 TE 偏振带隙, 归一化频率范围分别为 0.235 8 ~ 0.3 617, 0.453 7 ~ 0.551 6, 0.685 5 ~ 0.759 5(TM), 0.399 7 ~ 0.425 7(TE), 归一化中心频率 $f_0(a/\lambda)$ 分别为 0.298 8, 0.502 7, 0.722 5, 0.412 7, 带隙宽度分别为 0.125 9, 0.097 9, 0.074 0, 0.026 0, 由于光子晶体晶格常数 $a = 500$ nm, 根据禁带理论, 可提高出光效率波长范围分别为 1 382 ~ 2 120 nm, 906 ~ 1 102 nm, 658 ~ 729 nm, 1 174 ~ 1 251 nm, 中心波长分别为 1 674, 995, 692, 1 212 nm。

通过以上对光子晶体的能带结构分析, 可见改变占空比 R_p 的值可以对光子晶体的带隙进行调制, 带隙的个数及带隙的宽度都会随着 R_p 的变化而变化。对于不同结构的光子晶体均可找到用于提高 C 波段 LED 出光效率的能带结构, 其中正方排列介质柱光子晶体最优结构是占空比 $R_p = 0.2$ 、

三角排列空气孔光子晶体最优结构是占空比 $R_p = 0.44$, 三角排列介质柱光子晶体最优结构是占空比 $R_p = 0.25$ 。比较三者可以发现, 用于提高 C 波段 LED 出光效率最优的光子晶体结构为三角排列空气孔光子晶体晶格常数 $a = 500$ nm 且占空比 $R_p = 0.44$ 。

4 结 论

二维光子晶体是由介电常数不同的介质呈周期性排列而成, 它具有类似于半导体禁带的光子带隙。光子带隙限制了水平方向上的光场传播, 提高了垂直方向上的光出射, 从而达到提高 LED 出光效率的目的。可以通过改变占空比来对不同结构的二维光子晶体能带进行调制, 再根据禁带理论选择最优能带结构。结果表明, 用于提高 C 波段 LED 出光效率最优光子晶体结构为三角排列空气孔光子晶体晶格常数 $a = 500$ nm 且占空比 $R_p = 0.44$, 该结果为利用二维光子晶体提高 C 波段 LED 出光效率可提供理论依据, 具有一定的参考价值。

References

- [1] Halioua Y, Karle T J, Raineri F, et al. Appl. Phys. Lett., 2009, 95: 201119.
- [2] QIAN Kun, LI Fang-qiang, CHENG Mei-ying, et al(钱 昆, 李方强, 程美英, 等). Acta Optica Sinica(光学学报), 2010, 30(5): 1455.
- [3] ZHOU Zhi-ping, WANG Xing-jun, FENG Jun-bo, et al(周治平, 王兴军, 冯俊波, 等). Laser & Optoelectronics Progress(激光与光电子学进展), 2009, 46(10): 28.
- [4] Long D H, Hwang I K, Ryu S W. IEEE J. Sel. Top. Quant., 2009, 15(4): 1257.
- [5] YIN Zi-hao, WANG Qing-kang(殷子豪, 王庆康). Acta Sinica Quantum Optica(量子光学学报), 2009, 15(4): 358.
- [6] Chhajed S, Lee W, Cho J, et al. Appl. Phys. Lett., 2011, 98(7): 071102.
- [7] Kim B J, Jung H, Kim S H, et al. IEEE Photon. Technol. Lett., 2009, 21(11): 700.
- [8] Liu Z K, Gao W, Xu C, et al. J. Semicond., 2010, 31: 114011.
- [9] Wei T B, Hu R F, Duan X C, et al. J. Electrochem. Soc., 2010, 157(7): 721.
- [10] DU Xiao-qing, ZHONG Guang-ming, DONG Xiang-kun, et al(杜晓晴, 钟广明, 董向坤, 等). Optical Technique(光学技术), 2011, 37(5): 521.
- [11] CHEN Jian, WANG Qing-kang, LI Hai-hua(陈 健, 王庆康, 李海华). Acta Optica Sinica(光学学报), 2010, 30(1): 233.
- [12] Kim T, Leisher P O, Danner A J, et al. IEEE Photonic Tech. L., 2006, 18(17): 1876.
- [13] DU Wei, XU Xing-sheng, SUN Zeng-hui, et al(杜 伟, 许兴胜, 孙增辉, 等). Journal of Semiconductors(半导体学报), 2006, 27(5): 921.
- [14] Ryu H Y, Shim J I. IEEE J. Quant. Electron., 2010, 46(5): 714.

Research on Enhancement of the Extraction Efficiency of C-Band LED with 2D Photonic Crystals

WEI Ke-jia¹, LI Hong-qiang^{1*}, CHEN Hong-da², LI En-bang^{1,3}, LIU Zhi-hui¹

1. School of Electronics and Information Engineering, Tianjin Polytechnic University, Tianjin 300387, China

2. Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China

3. Centre for Ultrahigh Bandwidth Devices for Optical Systems, The University of Sydney, New South Wales 2006, Australia

Abstract On-chip light source is the main development part of the optoelectronic systems in the future. As on-chip light source, the main disadvantage of LED is its low extraction efficiency. Photonic crystal is an efficient method to increase the extraction efficiency of LED. The structure and parameters of the C-band LED was designed and the band gap of the 2D photonic crystals for different arrangement and different ratio was calculated using the finite-difference time-domain (FDTD) method, and then the best structural parameters of the 2D photonic crystals were determined using the method of band gap theory in this paper. Results show that the best structure is air holes PC with a triangular arrangement having a lattice constant of 500 nm and a ratio of 0.44.

Keywords Photonic crystals; Finite-difference time-domain (FDTD); Band gap; LED

(Received Mar. 31, 2012; accepted Jul. 20, 2012)

* Corresponding author

敬告《光谱学与光谱分析》编委

过去每期给编委的样刊，纸版传递一直很慢。从 2012 年 7 月起改为电子版在第一时间向编委发送《光谱学与光谱分析》样刊。

今秋 10 月《光谱学与光谱分析》编委换届，此前会有些信息需要通知和沟通。近年来，有些编委工作有所变动，沟通不便，有的甚至联系不上。为准确及时通知和沟通情况，请您将最近使用的电子信箱发给我们。同时将联系电话和备用电子信箱也一并发送至 chnghxygpfx@vip.sina.com，重新登记，请填好回执，以便确认。多谢协助，并希望编委之间相互转告。

姓 名	专 业	工作单位	联系电话	E-mail
				1
				2

《光谱学与光谱分析》期刊社
2012 年 5 月