

doi: 10.3788/gzxb20164511.1113001

GaN 基蓝光 LED 中光子晶体对提取效率及发光偏振态的影响

陆李峰, 叶志成

(上海交通大学 电子信息与电气工程学院, 上海 200240)

摘要: 为了提高氮化镓基蓝光发光二极管的发光提取效率, 在其电流扩展层上生长光子晶体. 讨论了光子晶体结构周期、刻蚀深度和占空比参数与提取效率的关系, 并采用时域有限差分法进行模拟计算. 结果表明在晶格周期为 300 nm、占空比为 60% 和刻蚀深度为 200 nm 的条件下, 生长光子晶体结构后, 氮化镓基蓝光发光二极管的提取效率提升了 27.93%. 研究了激励源在光子晶体晶格周期内位置变化对提取效率的影响, 拟合得到更符合实际物理意义的氮化镓基蓝光发光二极管发光提取效率函数. 利用等效折射率理论和法布里-珀罗薄膜干涉模型解释了氮化镓基蓝光发光二极管中 TE 模和 TM 模偏振之间提取效率的差异, 数值仿真得到最大差异值为 1.442 倍, 从而获得高偏振对比度光源. 用该结构参数制备的发光二极管器件应用于液晶显示背光源, 可提高液晶显示的能耗效率.

关键词: 发光二极管; 光子晶体; 偏振; 提取效率; 等效折射率; 时域有限差分

中图分类号: TN29; O436

文献标识码: A

文章编号: 1004-4213(2016)11-1113001-6

Extraction Efficiency and Polarization Induced by Photonic Crystal Structure on GaN-based Blue LED

LU Li-feng, YE Zhi-cheng

(School of Electronic, Information and Electrical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: In order to improve the extraction efficiency, photonic crystal was generated on the ITO current spreading layer of GaN-based blue LED. By using the finite difference time domain method, the relationship between the structural parameters of photonic crystal and extraction efficiency was simulated. The optimization enhancement results of 27.93% were obtained on the photonic crystal with cycle of 300nm, duty of 60% and etching depth of 200nm. Point source location varied in a photonic crystal lattice cycle was investigated in the finite difference time domain method simulation to get the correction extraction efficiency by fitting the simulations. Using the effective medium theory to get the effective refractive indexes, extraction efficiencies of both TE and TM mode polarization were calculated according to Fabry-Perot thin-film interference model. The maximum difference between the TE and TM light out-coupling was 1.442, and the light source with high polarization contrast was obtained. The proposed device can be applied in the LED back-light to improve the energy consumption of the liquid crystal display.

Key words: LED; Photonic crystal; Polarization; Extraction efficiency; Effective refractive index; Finite difference time domain

OCIS Codes: 130.3990; 130.5296; 230.5298; 050.1950; 050.2065

0 引言

20 世纪 90 年代初, 中村修二对氮化镓 (Gallium

Nitride, GaN) 基发光二极管 (Light Emitting Diode, LED) InGaN 层成膜的工艺技术进行了革新^[1-2], 获得了可商业化的高效率的蓝光 LED. 近几年来由 GaN 基

基金项目: 国家自然科学基金 (Nos. 61370047, 11374212, 61007025, 51235007, 11421064) 资助

第一作者: 陆李峰 (1983-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为光子晶体半导体器件、新型平板显示. Email: leo415@msn.com

导师 (通讯作者): 叶志成 (1977-), 男, 副研究员, 博士, 主要研究方向为纳米光学器件、新型显示探测器、硅基光波导器件等. Email: yzhch@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2016-02-19; 录用日期: 2016-06-07

<http://www.photon.ac.cn>

蓝光 LED 加黄色荧光粉生成的白光 LED 量产发光效率已超过 100lm/W,而理论计算的白光 LED 极限发光效率为 370~400lm/W^[3]. 所以白光 LED 产品的发光效率仍有较大提升空间. 除了材料方面,LED 器件的光学结构也是限制发光效率的主要因素.

在 LED 器件中,发光的有源层半导体材料折射率大于外部介质材料的折射率,因而当被激发光子的射出角度大于全反射角时将无法逸出 LED 器件并最终转化为热,使得 LED 提取效率无法提高,直接影响了 LED 的发光效率及寿命^[4].

表面粗化技术^[5]、异形 LED 芯片^[6]、倒装芯片技术^[6]、以及光子晶体技术^[7]都可以有效地提高 LED 的提取效率. 表面粗化技术的缺点是容易造成 P 型 GaN 表面缺陷增多,甚至破坏有源区或增加反向漏电流,降低内量子效率^[5];异形 LED 芯片加工难度与生产成本高^[6];倒装芯片技术已经与正装芯片和垂直芯片技术一样,被运用到一些实际生产中. 通过在 LED 器件中不同位置制备光子晶体结构来产生光子禁带效应^[8-9]和光栅衍射效应^[10-12],被认为是提高 LED 器件提取效率更有效的方式.

本文采用有限时域差分法(Finite Difference Time Domain, FDTD)研究 GaN 基蓝光 LED 在氧化铟锡(Indium Tin Oxides, ITO)电流缓冲层上制备光子晶体结构后的提取效率规律,着重讨论了光子晶体结构参数的改变与提取效率的关系,有源层中不同激励点源位置对提取效率影响以及光子晶体对不同偏振的提取效率提升差异,进而得到最大差异的光子晶体结构参数,论证降低液晶显示器件能耗的可能性.

1 原理

1987 年, E. Yablonovitch^[13] 和 S. John^[14] 分别提出了具有周期性折射率结构的自然生成或人造光学介质—光子晶体^[15] (Photonic Crystal, PhC) 的概念. 在 LED 照明领域,可利用光子晶体周期性结构的衍射效应来提高 LED 的提取效率. 其原理为:当 LED 有源层发出特定波长的光与周期参数同数量级的光子晶体发生作用时,导波模部分会被光栅结构调制,使得处于导光模的光进入逸出光锥内,并被耦合成出射光. 图 1 所示的光子晶体结构生长于 P 型 GaN 的表层,可以调整光子晶体结构参数来提高 LED 的提取效率.

由于光子晶体周期性结构对矢量电磁波的复杂散射无法得出解析解,光子晶体的能带结构、传输特性都是通过数值计算获得的. 目前光子晶体理论计算代表性的方法是 FDTD 法^[16].

FDTD 法由 Maxwell 方程在时域空间上差分得来,是求解 Maxwell 方程的直接方法^[17]. 具体求解步骤为:

- 1) 确定电磁场传播条件的介电常数分布函数;
- 2) 确定波长(或非单色光的频谱),振幅和初始相位构成的电磁场参数的初始条件;
- 3) 确定电磁场行为边界的计算区域边界条件.

这些条件都被设定后,从激励源开始,通过在离散网格上逐步计算求解 Maxwell 方程组来得到最终的电磁场分布^[18].

2 模型建立与模拟

2.1 模型及参数设置

模拟对象为传统正装 GaN 基 LED 器件结构,由电极层、ITO 电流扩展层、外延层(P 型 GaN,有源层, N 型 GaN)、金属反射层及蓝宝石衬底组成. 在 LED 器件结构的基础上,在 ITO 电流扩展层上刻蚀一维光子晶体结构,如图 1,形成透射光栅从而产生衍射效应.

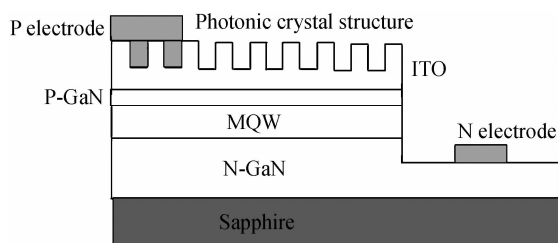


图 1 生长于 GaN 基 LED 的光子晶体结构
Fig. 1 PhC Structure on GaN-based LED

理想的光子晶体结构衍射出更多的出射光需要优化结构参数,由晶格常数(周期)、晶格形状(三维情况下可为孔或柱状)、不同介质的占空比和刻蚀深度决定. 由于计算机内存及处理器的限制,为了简化模拟过程,设置了一维的 ITO 光子晶体结构,如图 2,其中 GaN 基 LED 器件结构由 GaN 层和 ITO 层组成, GaN 层厚度为 3.4 μm ,折射率设为 2.5; GaN 层上为厚度为 200 μm 的 ITO 层,折射率设为 2. 在 ITO 层生成简化的一维光子晶体结构. 在模拟区域内设置周期数量为奇数,以保证模拟区域的对称性^[19-22]. 模拟区域其余设置为空气,折射率设为 1.

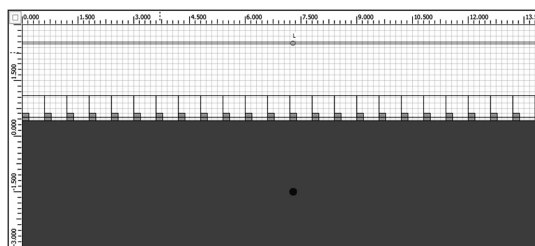


图 2 模拟结构示意图,包含激励源和观察接受面
Fig. 2 The dimension of GaN-based PhC LED simulation model with point source and receiver

有源层多量子阱(Multi-quantum well, MQW)处的激励点源设置于 GaN 层中,为中心波长 460 nm 的高斯调制连续波(Gaussian Modulated Continuous

Wave,GMCW). 激励点源距离 ITO 电流扩展层下表面为 $1.9 \mu\text{m}$,居于整个模拟区域横轴的中点,并且由于周期数量为奇数,激励点源始终处于光子晶体高折射率的中点,保证了激励点源的对称性.

整个模拟区域的四周边界条件设置为完美匹配层(Perfect Matched Layer,PML),可避免将模拟界面处的反射波计入,从而更真实地计算出提取效率.

模拟过程中晶格周期设置为 $100 \sim 900 \text{ nm}$,步长为 100 nm ,共 9 组;刻蚀深度设置为 $25 \sim 200 \text{ nm}$,步长为 25 nm ,共 8 组;占空比设置为 $10\% \sim 100\%$,步长为 10% ,共 10 组.

用不同光子晶体结构参数的模型分别对 TE 模和 TM 模进行了模拟.图 3 为光子晶体周期为 300 nm 、占空比为 50% 、刻蚀深度为 100 nm 的 TE 模和 TM 模的出光波形.可明显观察到,在处于 ITO 电流扩展层光子晶体的衍射效应作用下,出射光形成了较大角度的光锥,使得更多的出射光逸出,从而提高了 GaN 基 LED 的提取效率.

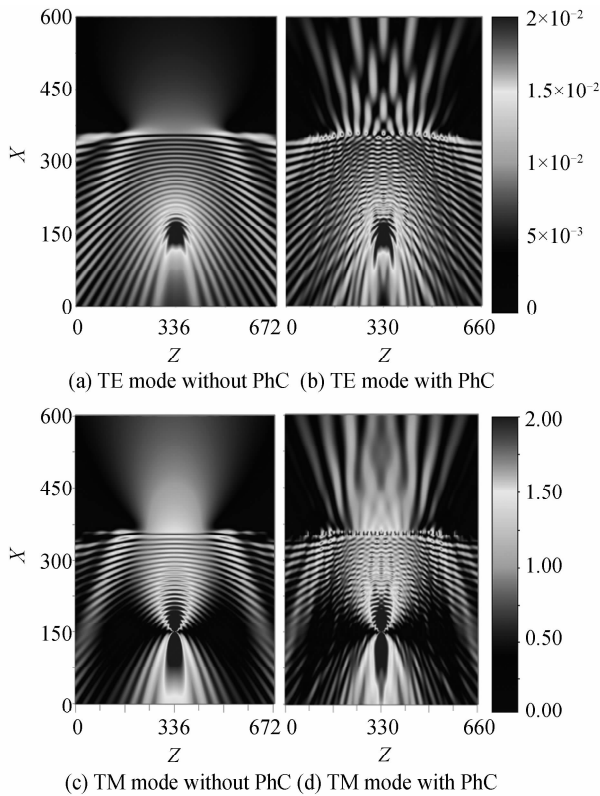


图 3 TE 模和 TM 模在生长光子晶体前后的光辐射模式对比

Fig. 3 Comparison on radiation mode for TE and TM mode with PhC and without PhC

2.2 模拟结果分析讨论

为了进一步定量得到提高光子晶体 GaN 基 LED 提取效率的最优化结构参数,对模拟数据进行分析.首先设定光子晶体占空比为 50% ,刻蚀深度为 200 nm ,得到 TE 模和 TM 模在不同周期下的提取效率.图 4

(a)中可以发现随着周期的变化,TE 模和 TM 模的提取效率也随之变化,其中 TE 模的提取效率增加率均高于 TM 模,但两者增加率在周期大于 500 nm 后有所下降.在 300 nm 周期条件下,TE 模和 TM 模的提取效率均达到最大值.

其次,设光子晶体晶格周期为 300 nm ,刻蚀深度为 200 nm .随着占空比的变化,TE 模和 TM 模在不同占空比下的提取效率也相应变化,见图 4(b).其中 TE 模和 TM 模分别在 30% 和 70% 的占空比的条件下达到最大提取效率,两者增加率的趋势呈互补关系.在占空比 60% 的条件下,TE 模和 TM 模提取效率的总和达到最大.

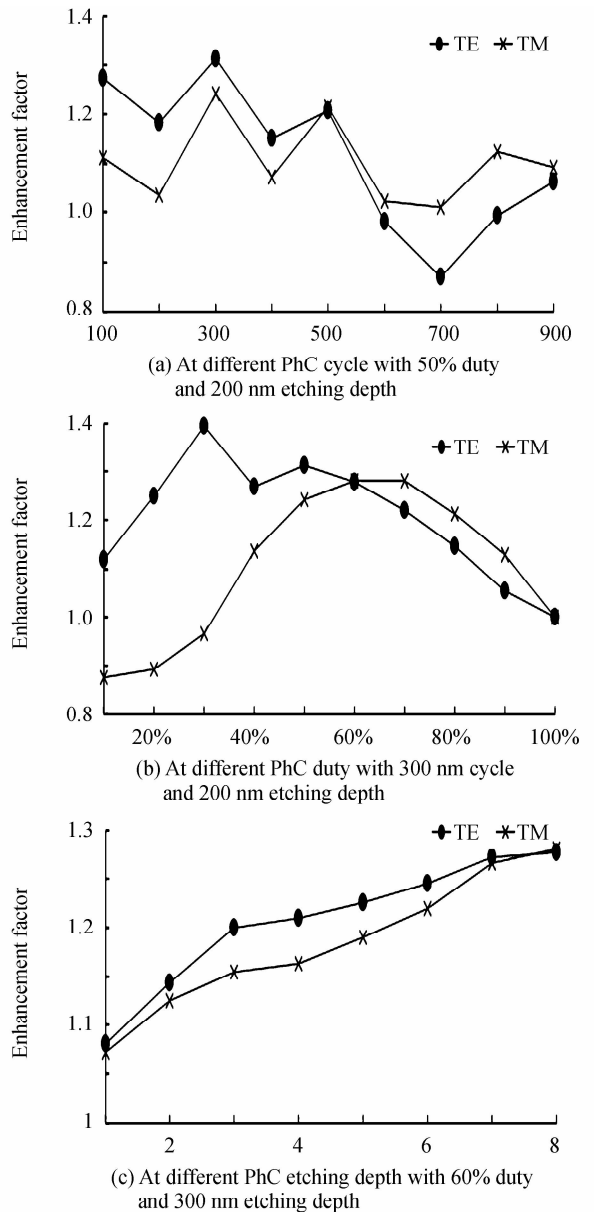


图 4 光子晶体周期参数组合得到的提取效率提高率
Fig. 4 Enhancement rate of PhC parameter combination

最后,设光子晶体晶格周期为 300 nm ,占空比为 60% ,得到 TE 模和 TM 模提取效率与刻蚀深度参数

的变化关系,见图 4(c).从中发现随着刻蚀深度的增加,TE 模和 TM 模提取效率也随之单调增加.直至将 ITO 电流扩展层完全刻穿,可得到最优的提取效率.

综合分析可知,ITO 电流扩展层上生长光子晶体的最优结构参数可设定为:晶格周期为 300 nm,占空比为 60%和刻蚀深度为 200 nm.经过 FDTD 的模拟计算,与未生长光子晶体结构的 GaN 基 LED 相比,得到总提取效率提升了 27.93%.

2.3 激励点源位置的调整

由于实际的 GaN 基 LED 器件发光是由有源层处无数的电子-空穴对复合产生光子造成的,而对于 2.2 节模拟的 GaN 基 LED 结构,由于在软件中设置多于一个以上激励点源在模拟过程中会产生相干干涉,影响模拟的准确性,故需讨论提取效率与激励点源在光子晶体一个周期内不同位置的关系.

如图 5,调整了 2.2 节中激励点源的位置,还原实际 LED 发光的物理过程,可较精确地得到实际光子晶体结构 GaN 基 LED 器件发光的提取效率,以此修正之前得到的提取效率为平均提取效率^[23].激励点源的位置在一个光子晶体晶格周期内分成 20 步后,分别进行提取效率的模拟,得到如图 6 的各点,并将各点进行多项式曲线拟合得到最优结构参数下趋近实际物理过程的最佳提取效率,提高率为 16.56%.

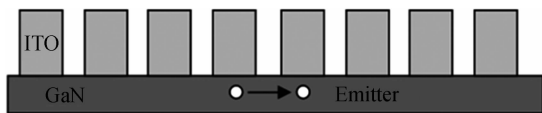


图 5 在一个光子晶体周期内激励源水平位置的调整

Fig. 5 Offset of point source in one cycle of PhC

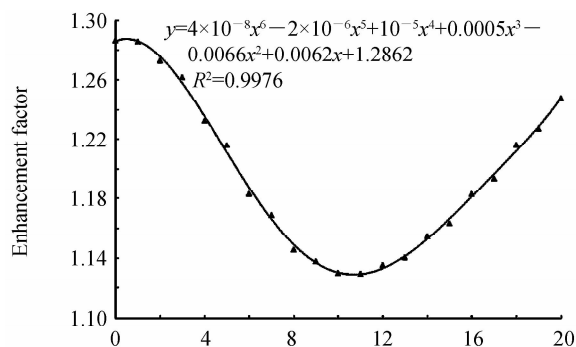


图 6 不同激励源位置得到的不同提取效率

Fig. 6 Enhancement rate of different point source location

3 光子晶体结构 GaN 基 LED 的偏振态讨论

3.1 光栅等效介质理论

等效介质理论是一种研究复合介质材料整体等效介电常数的主要理论,将复合介质材料整个看成是一种新的介质材料,其具有的介电常数被称为等效介电

常数,通过研究其等效介电常数来研究这种复合介质材料^[24-25].

考虑图 7 的情况,一维亚波长光栅由两种介电常数为 ϵ_1 和 ϵ_2 的材料交替组成,其折射率分别为 n_1 和 n_2 ,光栅周期为 Λ ,光栅占空比为 f ,入射光波长为 λ .由于光栅为亚波长结构,传统标量衍射理论无法精确地对其进行近似和假设,只可使用等效介质理论来推算其等效折射率.

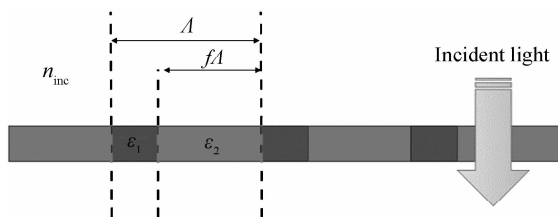


图 7 光子晶体等效介质示意图

Fig. 7 Effective medium theory of photonic crystal

根据等效折射率理论定义

$$\epsilon_{\text{eff}} \approx \frac{\mathbf{D}_{\text{avg}}}{\mathbf{E}_{\text{avg}}} \quad (1)$$

ϵ_{eff} 为等效介电常数,考虑 TE 模,电场方向平行于光栅刻蚀方向,边界条件决定了电场矢量 \mathbf{E}_{avg} 在介质界面处连续且为常量,设为 \mathbf{E}_0 ,故可得

$$\epsilon_{\text{TE}} \approx \frac{f\epsilon_1 \mathbf{E}_0 + (1-f)\epsilon_2 \mathbf{E}_0}{\mathbf{E}_0} = f\epsilon_1 + (1-f)\epsilon_2 \quad (2)$$

假设两种介质均为非磁介质,则

$$n_{\text{TE}} = \sqrt{f n_1^2 + (1-f) n_2^2} \quad (3)$$

考虑 TM 模,电场方向垂直于光栅刻蚀方向,边界条件决定了电位移矢量 \mathbf{D}_{avg} 在介质界面处连续且为常量,设为 \mathbf{D}_0 ,可得

$$\epsilon_{\text{TM}} \approx \frac{\mathbf{D}_0}{f\mathbf{D}_0/\epsilon_1 + (1-f)\mathbf{D}_0/\epsilon_2} \quad (4)$$

$$\epsilon_{\text{TM}}^{-1} = f\epsilon_1^{-1} + (1-f)\epsilon_2^{-1}$$

同样两种介质若均为非磁介质,则得到

$$n_{\text{TM}} = \frac{n_1 n_2}{\sqrt{f n_2^2 + (1-f) n_1^2}} \quad (5)$$

$n_{\text{TE}}, n_{\text{TM}}$ 为 TE、TM 模一阶近似等效折射率,从中可以看出,在占空比一样的情况下,TE 和 TM 的等效折射率不一样,是由于存在薄膜的法布里-珀罗 (Fabry-Perot) 干涉效应^[26].

3.2 光子晶体结构 GaN 基 LED 偏振态讨论

考虑如图 8 的光子晶体结构 GaN 基 LED 模型,该模型 ITO 层成膜厚度为 L ,且完全被刻蚀为光子晶体结构.其中 n_{Phc} 为 ITO 电流扩展层生成光子晶体的等效折射率,光子晶体晶格周期为 Λ ,占空比为 f .

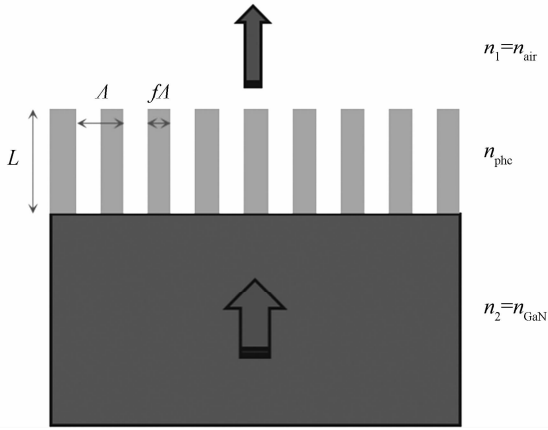


图8 光子晶体结构 GaN 基 LED 加强透射模型

Fig. 8 Model of transmission enhancement on GaN-based LED with PhC

根据 Fabry-Perot 薄膜干涉模型,要使得 ITO 层针对有源层发出的 460 nm 波长的光为增透层,则需要光子晶体等效折射率及 ITO 满足

$$n_{\text{Phc}} = \sqrt{n_1 n_2} = \sqrt{n_{\text{air}} n_{\text{GaN}}} = \sqrt{2.5} \approx 1.58 \quad (6)$$

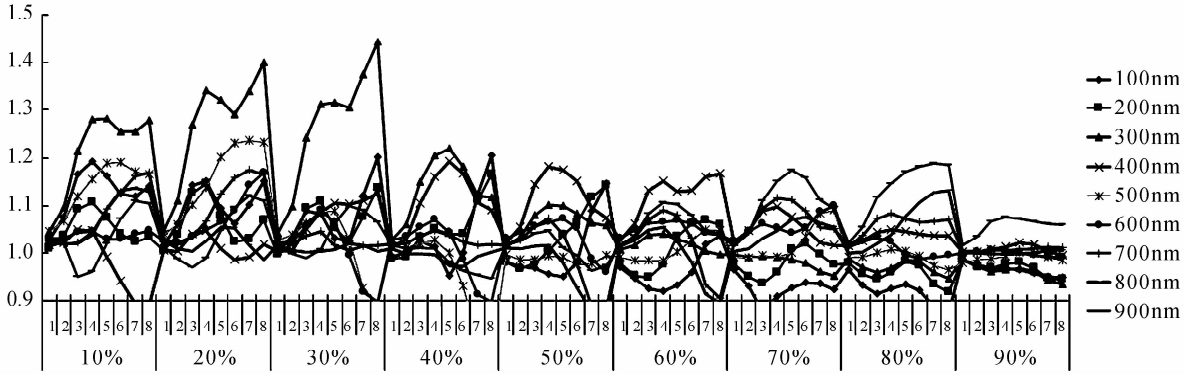


图9 TE 模与 TM 模提取效率比

Fig. 9 Extraction efficiency enhancement ratio of TE mode and TM mode

将模拟数据逐一比较,可以确认在光子晶体周期为 300 nm,占空比为 30%,刻蚀深度为 200 nm 的参数下,TE 模的提取效率增加 1.394 5 倍,而 TM 模的提取效率减少至原来的 0.967 0 倍,使得两者之比达到最大值,为 1.442,即在此光子晶体组合参数下,GaN 基 LED 发出的 TE 偏振光的能量比 TM 偏振光多增加 44.2%。

结合理论推算的理想增强透射的成膜厚度和占空比参数,与模拟得到的最大 TE 模与 TM 模提取效率之比的光子晶体参数较为接近。

按优化后参数生长的光子晶体 LED 可应用于液晶显示屏的偏振光背光源,在使用直下式背光方式下,可以减少 TM 偏振光在起偏偏振片的损耗,有效增加进入液晶盒的 TE 偏振光,提高液晶显示器的能耗效率。

成膜厚度满足透射增强关系,即

$$L = (2N + 1) \frac{\lambda}{4n_{\text{Phc}}} \quad (7)$$

式中, $N = 0, 1, 2, 3, \dots$. 当 N 取 0 及 1 时, L 取 72.73 nm 和 218.20 nm.

由式(3)和式(5)可推出

$$f_{\text{TE}} = (n_{\text{Phc}}^2 - n_1^2) / (n_2^2 - n_1^2) \approx 28.57 \quad (8)$$

$$f_{\text{TM}} = \left(\frac{1}{n_{\text{Phc}}^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) / \left(\frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \approx 71.43 \quad (9)$$

可以发现 TE 模提取效率最优的占空比并非 TM 模的最优占空比,同样对于 TM 模而言,对其提取效率最优的占空比也并非 TE 模的最优占空比。

采用第 2 节的光子晶体结构参数组合,比较了 TE 模和 TM 模在不同晶格周期、占空比和刻蚀深度的组合下的比值,如图 9,从中可以发现,在晶格周期为 300 nm,占空比为 20% 和 30% 的条件下,TE 模与 TM 模的提取效率之比有较明显的峰值。

4 结论

本文利用时域有限差分法研究了 GaN 基蓝光 LED 在 ITO 导电层上生长的光子晶体结构参数与发光提取效率的关系,得到了最优化提取效率下的光子晶体结构参数.研究了激励点源在光子晶体晶格周期内位置变化对提取效率的影响,拟合得到了更符合实际物理意义的 GaN 基蓝光 LED 发光提取效率函数,修正得到最优提取效率增加率为 16.56%.最后利用等效折射率理论和 Fabry-Perot 薄膜干涉模型推算出 GaN 基蓝光 LED 中 TE 模和 TM 模偏振之间提取效率的差异,数值模拟得到最大差异值为 1.44 : 1,从而获得偏振光源,为低能耗的液晶显示背光提供了设计思路。

参考文献

- [1] NAKAMURA S. GaN growth using GaN buffer layer[J]. *Applied Physics*, 1991, **30**(10(A)):1705 - 1707.
- [2] NAKAMURA S, MUKAI T, SENOH M. In situ monitoring and hall measurements of GaN with GaN buffer layers[J]. *Applied Physics*, 1992, **71**(11):5543 - 5549.
- [3] MURPHY T. Maximum spectral luminous efficacy of white light[J]. *Journal Applied Physics*, 2012, **111**(10):104909.
- [4] ZUKAUSKAS A, SHUR M, GASKA R. Introduction to solid-state lighting[M]. Chemical Industry Press, 2004: 28-29.
- [5] MA Long, YI Xiao-yan, GUO Jin-xia. Study on key technology of high power GaNLED [J]. *Journal of Semiconductors*, 2005, 26(z1):165-169.
- [6] ZUKAUSKAS A, SHUR M, GASKA R. Introduction to solid-state lighting [M]. Chemical Industry Press, 2004(12): 79-80.
- [7] SU Ping, XU Zhen-feng, GU Hua-rong. Photonic crystal light-emitting diodes[J]. *Optical Technique*, 2007, **33**(4): 505-509.
- [8] WIERE J J, KRAMES MR, EPLER J E, *et al.* InGaN/GaN quantum well heterostructure light emitting diodes employing photonic crystal structures[J]. *Applied Physics Letter*, 2004, **84**(19):3885-3887.
- [9] ORITA K, TAMURA S, TAKIZAWA T, *et al.* High extraction efficiency blue light emitting diode using extended pitch photonic crystal [J]. *Applied Physics*, 2004, **43**:5809-5813.
- [10] ODER T N, SHAKYA J, LIN J Y, *et al.* Nitride photonic crystals[J]. *Applied PhysicsLetter*, 2003, **83**(6): 1231-1233.
- [11] KIM D H, CHO C O, ROH Y G, *et al.* Enhanced light extraction from GaN based light emitting diodes with holographically generated two-dimensional photonic crystal patterns[J]. *Applied Physics Letter*, 2005, **87**(20): 203508-203510.
- [12] HAN D S, KIM J Y, NA S I. Improvement of light extraction efficiency of flip-chip light-emitting diode by texturing the bottom side surface of sapphire substrate[J]. *IEEE Photonics Technology Letters*, 2006, **18**(13):1406-1408.
- [13] YABLONOVITCH E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics[J]. *Physics Review Letter*, 1987, **58**(20): 2059-2062.
- [14] JOHN S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices[J]. *Physics Review Letter*, 1987, **58**(23):2468-2489.
- [15] SUKHOIVANOV I A, GURYEV I V. Photonic crystals physics and practical modeling [M]. Springer, 2009.
- [16] YEE K S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media [J]. *IEEE Transactions Antennas Propagation*, 1966, AP-14(3):302-307.
- [17] GE De-biao, YAN Yu-bo. FDTD method for electromagnet waves [M]. Xidian University Press, 2005.
- [18] GE De-biao, YAN Yu-bo. FDTD method for electromagnet waves [M]. Xidian University Press, 2005.
- [19] AURÉLIEN D, TETSUO F, RAJAT S. Photonic-crystal GaN light-emitting diodes with tailored guided modes distribution [J]. *Applied Physics Letter*, 2006, **88**(6): 061124.
- [20] ODER T N, SHAKYA J, LIN J Y. III-nitride photonic crystals[J]. *Applied Physics Letters*, 2003, **83**(6): 1231-1233.
- [21] BENISTY H, NEVE H D, WEISBUCH C. Impact of planar microcavity effects on light extraction—part i: basic concepts and analytical trends [J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1998, **34**(9):1612-1631.
- [22] BENISTY H, NEVE H D, WEISBUCH C. Impact of planar microcavity effects on light extraction—part II: Selected exact simulations and role of photon recycling[J]. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1998, **34**(9):1632-1643.
- [23] HUANG Sai-jun, YE Zhi-cheng, LU Jian-gang, *et al.* Position dependence of extraction efficiency in organic light-emitting diodes with photonic crystal structure[J]. *Chinese Optics Letters*, 2013, **11**(6): 062302.
- [24] SNYDER A W, LOVE J. Optical waveguide theory [M]. Springer, 1993.
- [25] LITTLE B E, HUANG W P. Coupled-mode theory for optical waveguides [J]. *Progress in Electromagnet Research*, 1995, **10**: 217.
- [26] SANG Tian, CAI Tuo, LIU Xiao-chun. Study on grating spectrum by one-dimension sub-wavelength effective medium theory [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2011, **48**(10): 100501.