

不同结构参数氮化镓基发光二极管芯片出光的蒙特卡罗方法模拟

洪 图,李书平,康俊勇*

(厦门大学 教育部微纳光电子材料与器件工程研究中心,福建省半导体材料及应用重点实验室,
物理与机电工程学院,福建 厦门 361005)

摘要: 发光二极管(LED)具有诸多优点,被人们看作是下一代照明器件.为了提高LED的光提取效率,使用蒙特卡罗方法,通过计算机编程,模拟了正装 GaN 基发光二极管芯片出光,分析考察了影响光提取效率的因素.结果表明,光提取效率随着封装材料折射率的增大而明显提高的现象仅发生在低于透明导电薄膜折射率的区间,过度提高封装材料的折射率对提高光提取效率并非有利;随着蓝宝石衬底厚度的增加,光提取效率曲线迅速上升并趋于平缓;此外,低吸收系数的透明导电薄膜、高反射率的反射镜亦可以显著提高LED光提取效率.

关键词: 蒙特卡罗方法;光提取效率;发光二极管(LED)

中图分类号: TN 312;O 242

文献标识码: A

文章编号: 0438-0479(2009)03-0326-04

发光二极管(LED)具有功耗低、寿命长、体积小、耐震动、驱动电压低、响应速度快等诸多优点,被人们看作是下一代照明器件,有望替代白炽灯、荧光灯,引发照明领域的新革命.发光效率是照明器件最关键指标之一,制约 GaN 基 LED 发光效率的主要因素为器件的外量子效率(出射光子总数与注入器件的电子-空穴对数目的比值).外量子效率可分解成内量子效率(器件内部电致产生的光子总数与注入器件的电子-空穴对数目的比值)与光提取效率的乘积.在目前成熟的外延技术条件下,LED 的内量子效率均很高,甚至可以达到 99%,可继续提升的空间不大^[1].但受制于芯片/空气全反射临界角、芯片材料的吸收、电极阻挡等因素,LED 的光提取效率仍处于一个较低水平,成为人们研究的一个热点^[1-4].

本文通过建立正装 GaN 基 LED 模型,采用蒙特卡罗方法模拟 LED 芯片出光,分析了封装材料折射率、蓝宝石衬底厚度、透明导电薄膜、电极反射率和底部反射镜反射率等结构参数对出光效率的影响,为 LED 芯片光学设计与制备提供了依据.

1 理论分析及模型

LED 所发出的光来自半导体的自发发射,其产生

的光子方向随机并且均匀分布于 4π 立体角.只需追踪每个光子的传播路径,统计逃逸出 LED 芯片光子数目占自发发射光子总数的比例即可得到光提取效率.而作为以概率和统计理论方法为基础的一种计算方法,蒙特卡罗方法在粒子输运计算、实验核物理、热力学计算、空气动力学等方面应用非常广泛^[5-9].由于其可对大量粒子行为进行模拟,因此其得出的结果与实际较为吻合.基于以上分析,我们认为利用随机数来解决问题的蒙特卡罗方法是对 LED 发光进行模拟的最佳方法.

本文以常用的大管芯正面出光叉指状电极芯片 LED 作为模拟对象建立模型,电极形状及芯片结构如图 1 所示.底部是使用电子束镀膜方法蒸镀的反射镜,其反射率为 80%;其上为蓝宝石外延衬底,不同生产商衬底减薄的厚度各不相同;外延的 N 型和 P 型 GaN 厚度采用典型数值(见表 1),并忽略作为有源层的多

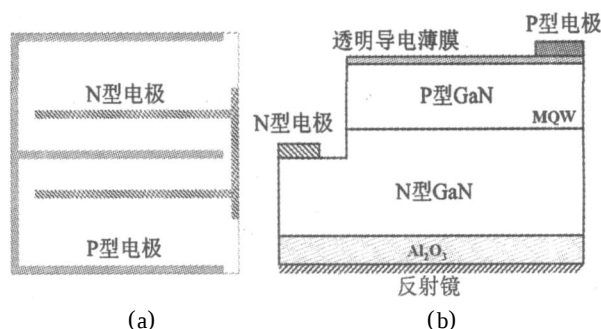


图 1 正装 LED 结构模型示意图
(a) 俯视图; (b) 截面图

Fig. 1 Schematic of the simulated face-up LED model

收稿日期:2008-10-10

基金项目:国家自然科学基金重点专项(60827004),国家自然科学基金(60776066)资助

*通讯作者:jykgang@xmu.edu.cn

量子阱厚度(一般仅几十纳米),由于 N 型和 P 型 GaN 折射率相差很小,在此视为相等;P 型 GaN 上为用于电流扩展的透明导电薄膜;在半透明导电层和 N 型沟槽上分别为不透明的反射率 60 % 的 P 电极和 N 电极;芯片周围为无边界的封装材料,并且不考虑封装材料的吸收。

表 1 L EDs 芯片模型中主要结构和材料参数
Tab. 1 Major simulation parameters of L EDs structure and materials

材料	厚度/ μm	折射率	吸收系数/ μm^{-1}
透明导电薄膜	0.20	1.90	0.10
P 型 GaN	0.15	2.40	0.01
N 型 GaN	1.52	2.40	0.01
蓝宝石	100	1.76	0.000001

我们将模型中有源层划分成 250×250 等份,每一分块均视为点光源. 每一点光源均产生 1 000 个方向随机,但具有统计 4π 立体角均匀分布的光子. 为此,我们采用 3 个随机数 (D_x, D_y, D_z) 来描述方向矢量 D_0 , 其变化范围均在 - 1 到 1 之间;同时,满足以下两个条件:

$$(D_x)^2 + (D_y)^2 + (D_z)^2 > \text{delta} \tag{1}$$

$$(D_x)^2 + (D_y)^2 + (D_z)^2 < 1 \tag{2}$$

其中 delta 为一小数,以保证计算不出现奇点以及沿各个方向概率相同. 在程序中采用 1 和 0 分别代表光子的存在和吸收两个状态.

根据不同位置光源所产生光子的方向矢量,确定光子的传播路径,得到光子遇到界面前的传播距离 h , 并结合材料吸收系数 α 计算出光子被材料吸收的概率

$$A_1 = 1 - \exp(-\alpha h) \tag{3}$$

为判断光子是否被吸收,计算中引入 (0,1) 范围的随机数 rand1,与吸收概率 A_1 比较. 当 $\text{rand1} < A_1$ 时,视光子被吸收;当 $\text{rand1} > A_1$ 时,光子继续传播.

当光子入射到透光的界面时,根据菲涅耳反射关系计算出反射概率 R_f ,引入 (0,1) 范围的随机数 rand2,与反射率 R_f 比较. 当 $\text{rand2} < R_f$ 时,光子反射;反之光子折射. 当光子入射到不透光的电极或者反射镜时,计算中引入 (0,1) 范围的随机数 rand3,与相应的反射率 A_2 (电极的为 60 %、反射镜的为 80 %) 比较. 当 $\text{rand3} < A_2$ 时,光子被反射;反之则吸收. 最后,根据逃逸出芯片的光子总数占光源产生总光子数的比例,计算出光提取效率. 计算程序流程图如图 2 所示.

2 结果和讨论

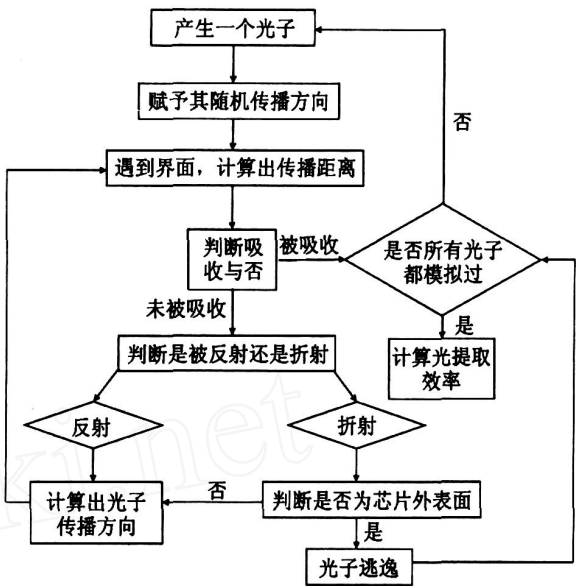


图 2 蒙特卡罗模拟流程图
Fig. 2 Flow chart for Monte Carlo simulation of a single photon

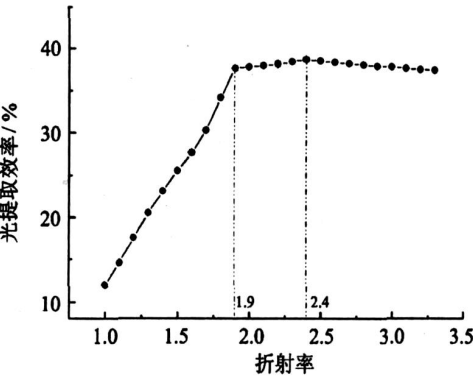


图 3 光提取效率与封装材料折射率关系曲线图
Fig. 3 Light extraction efficiency versus refractive index of encapsulation material

2.1 封装材料折射率对光提取效率的影响

图 3 为光提取效率与封装材料折射率关系曲线图. 随着透明导电薄膜的折射率从 1.0 增大到 1.9,封装材料与作为正面出光窗口的透明导电薄膜间的折射率差别逐渐减小,全反射角逐渐增大,逃逸出芯片的光子总数增多,光提取效率提高幅度达到 216 %. 当 GaN 的折射率从 1.9 增加到 2.4 时,封装材料与 GaN 间的折射率差别减小,增大了光子入射到 GaN 与外界之间界面时的出光几率,但却使封装材料与透明导电薄膜间的折射率差别增大,使得相应界面处的反射增强,降低了光子入射到透明导电薄膜与外界之间界面时的出光几率,这两个作用相互抵消,光提取效率基本保持不变. 随着封装材料折射率的继续增大,ITO、GaN 与封装材料间的折射率差增大,使得芯片与封装材料的所

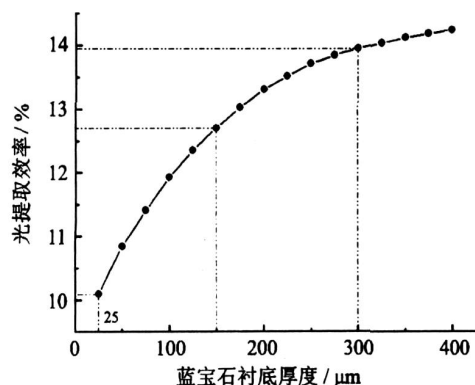


图4 光提取效率与蓝宝石衬底厚度关系曲线图

Fig. 4 Light extraction efficiency versus the thickness of sapphire

有界面处反射现象均增强,逃逸出芯片的光子总数减少,光提取效率也就随之缓慢减小。由模拟结果可知,如果使用折射率为 1.9 的材料代替目前被广泛采用的折射率为 1.5 的树脂作为封装材料,可使光提取效率提高约 47.0%,为选择封装材料提供了依据。

2.2 蓝宝石衬底厚度对光提取效率的影响

图 4 为光提取效率与蓝宝石衬底厚度的关系曲线图。随着蓝宝石厚度的增加,光提取效率曲线单调上升并逐渐变缓。当蓝宝石厚度从 300 μm 减薄到 150 μm ,光提取效率从 13.9% 减小到 12.7%,降低幅度为 8.6%;当厚度从 150 μm 减薄到 25 μm ,光提取效率从 12.7% 减小到 10.1%,降低幅度为 25.7%。这种变化趋势可归结为蓝宝石的吸收系数很小,根据式(3),即使厚度为 300 μm 的蓝宝石透射率也能达到 99.97%,因此光基本上不被蓝宝石所吸收。而蓝宝石占整个芯片厚度的绝大部分,减薄蓝宝石将导致芯片变薄,从而增加光子与反射镜相遇和被其吸收的几率,降低光提取效率。同时,减薄蓝宝石将使出光面积减少,也在一定程度上影响光子逃逸。

在 LED 芯片制造过程中,为防止由蓝宝石衬底导热性能较差而引起芯片温度过高,进而影响 LED 光输出特性和寿命,人们常对蓝宝石衬底进行减薄以提高器件的散热性能。由上述结果看,过薄的蓝宝石衬底会显著降低光提取效率。因此,在实际生产过程中,应优化蓝宝石厚度,以兼顾 LED 的散热和光提取效率。

2.3 透明导电薄膜吸收系数、反射镜反射率、电极反射率对光提取效率的影响

在 GaN 基 LED 芯片中,透明导电薄膜的吸收系数远大于 GaN 和蓝宝石,所吸收的光子占总吸收光子数的很大一部分。在此模拟了不同吸收系数的芯片出光,结果如图 5 所示。随着吸收系数的减小,光提取效率明显提高。当吸收系数从 1.0 μm^{-1} 减小到 0.1

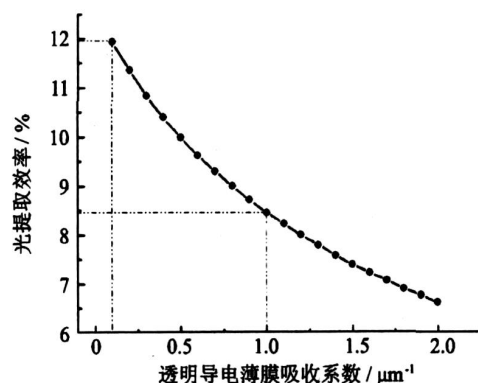


图5 光提取效率与透明导电薄膜吸收系数关系曲线图

Fig. 5 Light extraction efficiency versus the absorption coefficient of transparent

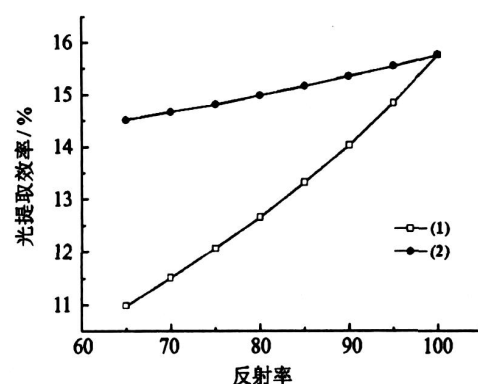


图6 光提取效率与反射率关系曲线图

(1) 反射镜反射率; (2) 电极反射率

Fig. 6 Light extraction efficiency versus the reflectivity

μm^{-1} 时,透射率从 81.9% 提高到 98.0%,光提取效率相应地从 8.5% 提高到 11.9%,提升幅度为 40.0%,可见使用低吸收系数透明导电薄膜,特别是用透射率高的 ITO 代替 Ni/Au,可大幅度地提高光提取效率。

反射镜和电极在一定程度上影响光提取效率。图 6 为光提取效率与反射镜和电极反射率的关系曲线图。无论对于反射镜还是电极,其反射率的增大都不同程度地增进光提取效率。其中电极的面积较小,对光提取效率的影响较弱,当电极反射率从 70% 提高到 95% 时,光提取效率相应地从 14.7% 提高到 15.5%,提升幅度仅为 5.4%。反射镜面积与芯片尺寸相等,对光提取效率的影响明显。当反射镜反射率从 70% 提高到 95% 时,光提取效率相应地从 11.5% 提高到 14.8%,提升幅度为 28.7%。由此可见,反射镜对 LED 芯片光提取效率的重要作用。

3 结 论

本文使用蒙特卡罗方法模拟了不同结构参数下 LED 芯片出光,结果表明,光提取效率随着封装材料

折射率的增大而明显递增的现象仅发生在低于透明导电薄膜折射率的区间,过度提高封装材料的折射率对提高光提取效率并非有利;增加蓝宝石衬底的厚度会显著提高光提取效率,在实际生产过程中,应优化蓝宝石厚度,以兼顾LED的光提取效率和散热;选用低吸收系数的透明导电薄膜、高反射率的反射镜和电极,尤其是透明导电薄膜和反射镜,均可提高光提取效率。当然,以上结论建立在芯片有源层电流分布均匀的前提条件之上,实际芯片中的电极形状不同,有源层电流分布也非均匀,因此模拟有源层电流分布并与出光模拟结合将是我们下一步工作的重点。

参考文献:

- [1] 齐云,戴英,李安意.提高发光二极管LED外量子效率的途径[J].电子元件与材料,2003,22(4):43-45.
- [2] Kim Hyunsoo, Cho Jaehee, Lee Jeong Wook, et al. Enhanced light extraction of GaN-based light-emitting diodes by using textured n-type GaN layers[J]. Applied Physics Letters, 2007, 90:161110.
- [3] Murai Akihiko, Thompson B Daniel, Masui Hisashi, et al. Hexagonal pyramid shaped light-emitting diodes based on ZnO and GaN direct wafer bonding[J]. Applied Physics Letters, 2007, 89:171116.
- [4] Su Y Mark, Mirin P Richard. Enhanced light extraction from circular Bragg grating coupled microcavities[J]. Applied Physics Letters, 2006, 89:033105.
- [5] 颜峻,于映.基于蒙特卡罗模拟方法的光源用LED封装光学结构设计[J].光学学报,2004,25(1):90-94.
- [6] 裴鹿成,张孝泽.蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用[M].北京:科学出版社,1980.
- [7] 许淑艳.蒙特卡罗方法在实验核物理中的应用[M].北京:原子能出版社,1996.
- [8] Leonel A S, Coura Zimmermann Pablo, Pereira R A, et al. Monte Carlo study of the critical temperature for the planar rotator model with nonmagnetic impurities[J]. Physical Review B, 2003, 67:104426.
- [9] Marmidis Grigorios, Lazarou Stavros, Pyrgioti Eleftheria, et al. Optimal placement of wind turbines in a wind park using Monte Carlo simulation[J]. Renewable Energy, 2008, 33:1455-1460.

Monte Carlo Simulation on Light Extraction Efficiency of GaN-based Light Emitting Diodes with Different Structure Parameters

HONG Tu, LI Shu-ping, KANG Jun-yong *

(Eng. Res. Center for Micro-nano Optoelectronic Materials & Devices of State Education Ministry,

Key Laboratory of Semiconductors and Applications of Fujian Province,

School of Physics and Mechanical & Electrical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: Light-emitting diodes(LEDs) have many advantages and are regarded as the next generation light source. To improve the light extraction efficiency, light extraction simulation of face-up GaN-based light-emitting diodes(LEDs) with Monte Carlo method is presented. It is shown that only when the refractive index of encapsulation material ranges from the refractive index of air to that of transparent conductive thin film, the light extraction efficiency can be improved significantly by increasing refractive index of encapsulation material. Raising the refractive index of encapsulation material over that of transparent conductive thin film won't obviously increase the light extraction efficiency; when the sapphire thickness increases, the light extraction efficiency will increase rapidly first and then be saturated; besides, transparent conductive thin film with low absorption coefficient and high reflectivity bottom reflector can also improve the light extraction efficiency significantly.

Key words: Monte Carlo method; light extraction efficiency; light-emitting diodes(LED)