

文章编号: 1672-8785(2014)04-0013-05

用 PCS 提高 QWIP-LED 光提取效率的仿真研究

侯义合 张冬冬

(中国科学院上海技术物理研究所红外探测与成像技术重点实验室, 上海 200083)

摘 要: 量子阱红外探测器发光二极管 (Quantum Well Infrared Photodetector Light Emitting Diode, QWIP-LED) 是一种新型红外上转换器件, 配合电荷耦合器件 (Charge Coupled Device, CCD) 能够实现中波红外成像探测。与常规红外成像器件相比, QWIP-LED 最大的优势在于成本低。然而, QWIP-LED 较低的光提取效率 (约 2%) 严重制约了该器件的广泛应用。以提高 QWIP-LED 的光提取效率为目标, 在 LED 表面引入二维光子晶体薄膜 (Photonic Crystal Slab, PCS) 结构, 采用时域有限差分法 (Finite-Difference Time-Domain, FDTD) 计算了其光提取效率的改善效果, 并对 PCS 的结构参数进行了优化。仿真结果表明, 优化的 PCS 可以使 QWIP-LED 的光提取效率提高 2.32 倍。最后, 基于 PCS 的能带理论以及等效介质理论, 对 PCS 结构提高器件光提取效率的机理进行了分析。

关键词: QWIP-LED; 二维光子晶体薄膜; 光提取效率

中图分类号: TN214 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2014.04.003

Study of Light Extraction Efficiency of QWIP-LED Enhanced by Photonic Crystal Slab Based on Simulation

HOU Yi-he, ZHANG Dong-dong

(Key Laboratory of Infrared System Detection and Imaging Technology, Shanghai Institute of Technical Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200083, China)

Abstract: A Quantum Well Infrared Photodetector Light Emitting Diode (QWIP-LED) is a new infrared up-converter. When combining with a Charge Coupled Device (CCD), it can be used for mid-wave infrared imaging detection. Compared with the conventional infrared imaging devices, QWIP-LEDs have a remarkable advantage of low cost. However, because of the low light extraction efficiency ($\sim 2\%$), their application is limited. To improve the light extraction efficiency of the QWIP-LED, a Photonic Crystal Slab (PCS) is incorporated into the surface of the LED. Then, a Finite Difference Time Domain (FDTD) method is used to calculate the improved light extraction efficiency, so as to optimize the structure parameters of the PCS. The simulation result shows that by using an optimized PCS, the light extraction efficiency of the QWIP-LED can be increased by a factor of 2.32. Finally, the mechanism for the PCS to increase light extraction efficiency is analyzed according to the band theory and equivalent medium theory.

Key words: QWIP-LED; photonic crystal slab; light extraction efficiency

收稿日期: 2014-03-24

作者简介: 侯义合 (1986-), 男, 博士研究生, 山东日照人, 主要从事 QWIP-LED 器件方面的研究。

E-mail: house4366@163.com

0 引言

红外上转换器件 QWIP-LED 是红外热成像领域的新秀。Liu 等人在 1995 年首次实现器件模型^[1]并进行了长期的改进和优化^[2,3]。中科院上海技术物理研究所的相关研究人员也成功研制了 n 型 QWIP-LED 器件,将波长为 8.9 μm 的中波红外光转换成了波长为 876 nm 的近红外光^[4]。基于 QWIP-LED/CCD 的红外成像系统首先利用 QWIP-LED 将收集到的中长波红外光转换成近红外光并将其出射,然后由 CCD 收集近红外光,实现电子学图像的获取。因 QWIP-LED 基于无分立像元结构,同时不需要集成电子学读出电路,与 InSb、HgCdTe 等传统红外热成像器件相比,具有易于大面阵化、低成本、低制冷需求等优点。

然而,由材料高折射率导致的低光提取效率严重制约了 QWIP-LED 广泛的工程应用。由 Snell 定律可知,对于材料折射率为 $n=3.5$ (GaAs 基底)的 QWIP-LED 器件,其光提取效率小于 $1/4n^2(\approx 2\%)$ 。为了提高 LED 的光提取效率,人们设计了一系列器件改善方案^[5-8],如表面粗糙化、制作布拉格反射结构和倒金字塔结构 LED 等。这些方法都在一定程度上改善了普通 LED 的发光效率,但不适用于 QWIP-LED 图像输出器件。

PCS 是二维光子晶体在实际应用中常见的存在形式。它对 LED 发光性能的改善已经得到了理论和实验两方面的有力支持^[9-13]。文献[9]在折射率为 3.5 的 LED 器件中制作了环绕式的 PCS 结构,将 LED 的光出射效率提升了 5 倍。文献[10]中,由于 PCS 结构的光子禁带对 LED 发光方向性的重新分配,出射光通量占总发光通量的比重得以大幅度提高,从而显著提高了 LED 的光提取效率。两篇文献所设计的 LED 的共同特点是 PCS 结构贯穿光源所在的有源层。PCS 对 LED 光出射效率的提高作用主要是通过光子禁带对带内导波模式的抑制实现的。而对于将 PCS 结构制作在 LED 电极层的情况,PCS 结构所发挥的作用有所不同。文献[11]和[12]展

示了制作在 OLED 的玻璃基底与 ITO 层之间(远离有源层)的 PCS 结构,使 OLED 的光提取效率比普通 OLED 提高了 1.9~2.3 倍。在这类 LED 器件中,由于 PCS 的引入使得导波模式的频率存在上限,频率高于上限的光会以漏波模式成为出射光。

QWIP-LED 器件作为一种用于图像转换的器件,有源层的完整性必须得到保证。利用 PCS 结构提高光学效率时,要将该结构置于对图像质量影响最小的电极层。本文主要对 QWIP-LED 引入 PCS 结构后的光提取效率进行研究。具体途径是借助 EastFDTD 电磁场专业模拟计算软件计算 PCS 结构对 QWIP-LED 的光提取效率的增强效果,并对 PCS 结构参数进行一定程度的优化。

1 理论分析与建模

1.1 时域有限差分

EastFDTD 使用时域有限差分(Finite difference time domain, FDTD)作为计算空间电磁场的根本方法,借助著名的 Yee 元胞将 Maxwell 方程组转换成差分形式^[14],根据初始条件和边界条件,在时间上进行迭代求解,最终得到空间各点的电磁场分量。

为保证计算的有效性,空间和时间步长的选择必须满足 Courant 稳定条件,也即空间步长通常选择为参考波长的十二分之一,时间步长满足

$$c\Delta t \leq \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2}}} \quad (1)$$

1.2 基本模型

QWIP-LED 器件的 LED 区域结构如图 1 所示。LED 表层为上电极层(GaAs),厚度为 1000 nm,该层是制作光子晶体薄膜的区域。第二中间过渡层($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$)的厚度为 190 nm,然后是 30 nm 的 GaAs 层,最后是 9 nm 的 LED 有源区(InGaAs/GaAs),有源区发光的中心波长为 870 nm。

PCS 结构制作在电极层上表面,以正三角形周期排列的空气孔为基本晶格单元。结构参

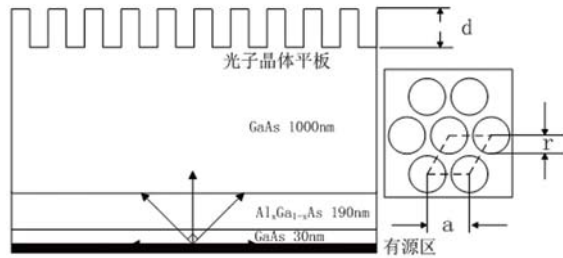


图 1 QWIP-LED 器件 LED 区域模型以及光子晶体薄膜制作的示意图

数主要有晶格常数 a 、填充因子 r/a (r 为圆孔半径) 和孔深 d 。创建模型时, 为了降低计算机的计算量同时又保证数值计算体现光子晶体的无限周期特性, 模型尺寸的范围是沿 x 方向为 $6a$, 沿 y 方向为 $7a$, 将横向边界条件设定为周期性边界条件, 并将竖直方向上的计算边界设定为全吸收匹配边界 (PML)。在有源区中心设定高斯点光源作为激励光源, 时域曲线如图 2 所示。光源波长范围覆盖 QWIP-LED 的发光波长为 870 nm。模型中, 在 LED 出射空间设置光通量记录器, 用于记录出射空间任意一平面内各点光通量密度的时间平均值。

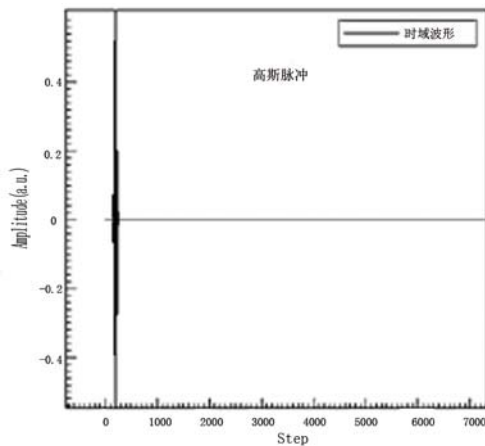


图 2 点光源的时序波形图

计算中设定对照模型 (常规 QWIP-LED 器件)。该对照模型没有 PCS 结构, 除此之外其它参数均与含 PCS 结构的模型一致。

2 数值计算

相对光提取效率 (η_r) 定义为有 PCS 结构的 LED 的光提取效率 (η_p) 与无 PCS 结构的 LED 光

提取效率 (η_{np}) 的比值, 可用来衡量 PCS 结构对 LED 光提取效率的改善效果。 η_p 和 η_{np} 都可以表示为

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{all}} \quad (2)$$

式中, P_{out} 为出射光通量, P_{all} 为点光源总辐射通量。因此相对光提取效率可表示为

$$\eta_r = \frac{\eta_p}{\eta_{np}} = \frac{P_{pout}}{P_{npout}} \quad (3)$$

式中, P_{pout}, P_{npout} 分别为含 PCS 结构和不含 PCS 结构的 LED 的出射光通量。

对模型光通量记录器所得到的平均光通量密度在平面内求平均, 得到截面各点时间平均光通量密度的截面平均值, 记为 $\bar{S}$ 。同样, 对于对照模型, 也可得到 P_{pout} 和 P_{npout} 。将两值分别乘以共同的界面面积, 即可分别得到 P_{pout} 和 P_{npout} 。将其代入 (3) 式, 即可得到 η_r 。

2.1 相对光提取效率随 r/a 变化的曲线

首先对 PCS 的晶格常数 a 和厚度 d 设定确定值。连续改变晶格单元的半径, 计算不同 r/a 值的 PCS 对 LED 的相对光提取效率, 得到如图 3 所示的曲线。

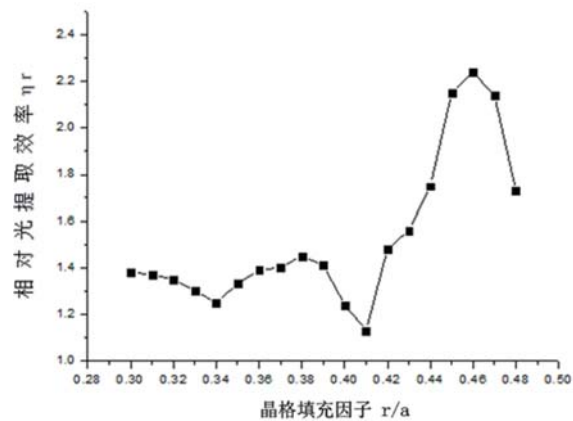


图 3 PCS 的相对光提取效率 η_r 随晶格 r/a 变化的曲线

该曲线显示, 当 r/a 取值 0.46 时, 得到的最大相对光提取效率为 2.24。当 r/a 值继续增大时, 相对光提取效率明显减小。

2.2 相对光提取效率随 a 变化的曲线

对影响光子晶体薄膜光提取效率的晶格常数进行扫描计算, 将其填充比参数设定为上一节得到的最优 r/a 值。逐步改变晶格常数 a , 将

其取值范围设定为 $[500\text{ nm}, 1010\text{ nm}]$ ，将扫描步长设定为 30 nm 。计算每一组参数模型的相对光提取效率 η_r ，得到 η_r 随 a 变化的曲线，如图 4 所示。

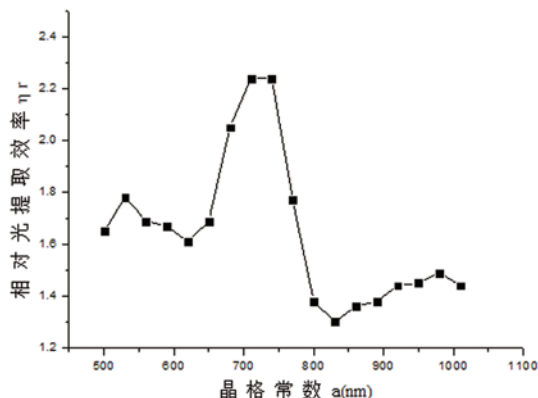


图 4 PCS 相对光提取效率 η_r 随晶格常数 a 变化的曲线

该曲线显示，当晶格常数 a 取 710 nm 时，相对光提取效率取得极大值 2.24 ，然后随晶格常数的逐渐变大，相对光提取效率迅速减小。

2.3 相对光提取效率随光子晶体薄膜厚度 d 变化的曲线

以上两节优化了 PCS 的结构参数：晶格填充因子 r/a 和晶格常数 a 。PCS 不同的厚度（空气孔深度 d ）对相对光提取效率也有一定的影响作用。通过计算不同 d 值下模型的相对光提取效率确定晶格最优化 d 值。将 d 值的取值范围设定为 $[200\text{ nm}, 590\text{ nm}]$ ，将 d 的扫描步长设定为 30 nm 。采用相同的数据获取和处理方案，得到了如图 5 所示的 η_r 随 d 的变化曲线。该曲线显

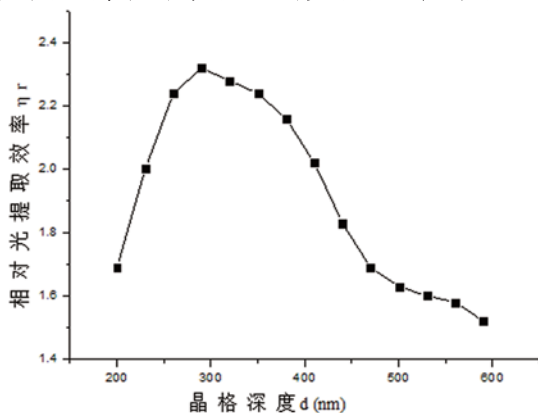


图 5 PCS 相对光提取效率 η_r 随晶格孔深度 d 变化的曲线

示，在 $d=290\text{ nm}$ 处，相对光提取效率的最大值为 2.32 。

2.4 光子晶体结构参数的确定以及相应的频率响应

通过对参数进行扫描计算，确定了一组最优的 PCS 结构参数：晶格填充因子取 0.46 ，晶格常数取 710 nm ，晶格孔深度取 290 nm 。选用该组参数的 PCS 使得器件在 870 nm 波长处的光提取效率比原来提升了 2.32 倍。根据本研究所针对的 QWIP-LED 器件发光波长范围 ($870 \pm 10\text{ nm}$)，同时考虑到可能出现的波长漂移，我们需要研究 PCS 结构相对光提取效率在 870 nm 波长附近随波长的变化情况。

设置的激励光源可确保光波频率覆盖 870 nm 两侧较宽的频率范围。要获得不同波长的相对光提取效率，只需要在仿真模型中设置相应波长的能流记录器即可。波长的变化范围设定为 $800 \sim 940\text{ nm}$ ，采样间隔为 5 nm 。最终得到了相对光提取效率随波长变化的曲线，如图 6 所示。

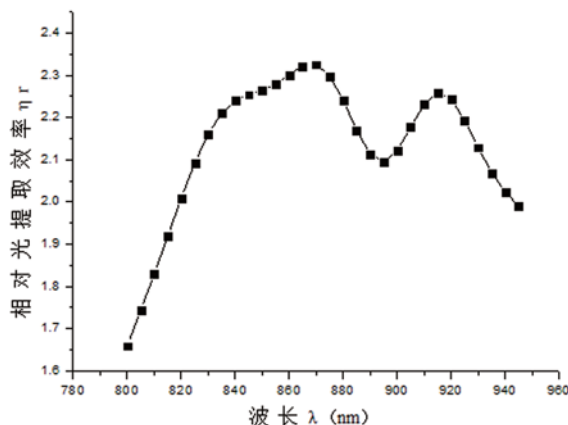


图 6 PCS 相对光提取效率 η_r 随波长变化曲线 ($r/a=0.46$, $a=710\text{ nm}$, $d=290$)

该曲线显示，在较宽的波长范围内，相对光提取效率都大于 2.1 。所以对于发光中心波长为 870 nm 、半波宽度为 10 nm 的 QWIP-LED，该结构可以有效地提高其光出射效率。

3 分析

在无 PCS 结构的 LED 器件中，光在整个频域空间都存在导波模式。如图 7(a) 所示，出射

光锥以外存在各个频率的 TE 和 TM 导波。导波模式的广泛分布使得出射角大于全反射角的光波被困在介质层内部, 并最终成为耗散光。这是器件低光提取效率的主要原因。PCS 结构的引入可改变器件的光子能带结构。图 7(b) 给出了正三角排列空气孔 PCS 结构的能带图。能带结构图可参考文献 [8]。理论研究表明, PCS 对 LED 的光提取效率产生影响主要是通过两方面实现的: 一是引入光子禁带, 频率处于禁带内的 LED 光处于导波模式被抑制状态, 因而漏波模式是光波唯一向外传播的方式, 因此出射效率得以提高; 二是 PCS 结构可限定导波模式的最高频率, 高于该频率的光能够成为漏波模式从 LED 出射, 从而提高出射效率。通常情况下, 两种机理不能同时存在。对于本文所得到的最优 PCS 结构, 在发光波长处并未产生光子禁带。QWIP-LED 发光的中心波长为 870 nm, 对应频率为 0.81 (c/a), 高于导波模式的频率上限。所以光波频率高于 PCS 所限定导波模式的最高频率是本研究中 PCS 能够提高 QWIP-LED 光提取效率的主要原因。

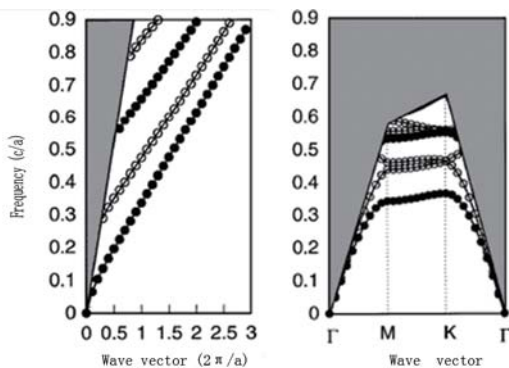


图 7 (a) 在无 PCS 结构的普通 GaAs 波导中 TE 模式导波的能带结构图, 实心圆为偶对称 TE 模式的能带, 空心圆为奇对称 TE 模式的能带 (b) 在 GaAs 波导中引入 PCS 结构后的能带结构图, 实心圆和空心圆分别对应 TE 和 TM 模式导波。PCS 以正三角排列空气穿孔为基本单元。

为了保护 QWIP-LED 器件的电气特性不受破坏, 将 PCS 结构制作在电极层。与标准的完全沉浸于空气介质的 PCS 结构不同, 本设计中 PCS 上侧是空气, 下侧是折射率为 3.5 的 GaAs

介质基底。该结构特点决定了在出射光的出射路径上引入了额外的介质界面。该界面对入射光有一定的反射作用。根据等效介质理论^[14], PCS 的 TE 模式和 TM 模式的等效折射率分别为

$$n_{TE} = (f_1 n_1^2 + f_2 n_2^2)^{1/2} \quad (4)$$

$$n_{TM} = (f_1/n_1^2 + f_2/n_2^2)^{-1/2} \quad (5)$$

式中, f_1 、 f_2 分别为折射率为 n_1 和 n_2 的材料体积占比, 满足关系 $f_1 + f_2 = 1$ 。利用计算优化所得到的 PCS 结构参数可以得到两种偏振模式的折射率, 它们分别为 1.89 和 1.12。入射光从有源层进入 PCS 层是从光密介质进入光疏介质, 在介质界面上会产生反射, 使得进入 PCS 的光子数减少, 从而降低 PCS 对整个器件光提取效率的贡献。

4 结论

对 PCS 结构用于提高 QWIP-LED 的光提取效率进行了仿真计算和优化设计, 得到了一组可使 QWIP-LED 的光提取效率最大化的 PCS 结构参数 ($a=710$ nm, $r/a=0.46$, $d=290$ nm), 将光提取效率提高到了常规器件的 2.32 倍。基于 PCS 能带理论进行分析发现, 器件的发光频率并未处于 PCS 结构的光子禁带位置, 而是高于导波模式的最高频率。所以在本研究中, PCS 改善光提取效率的主要机理是发光频率高于导波模式频率上限, 使得更多光波成为出射光。另外从频谱角度分析, 频率响应曲线反映出器件在以 870 nm 为中心波长、以 10 nm 为半波宽度的波长范围内保持了较高的光提取效率, 与 QWIP-LED 的发光波长范围相符。另一方面, 基于等效介质理论对 PCS 下表面反射入射光问题进行的分析表明, 单纯使用 PCS 更大限度地提高 QWIP-LED 器件的光学效率有较大难度。

参考文献

- [1] Liu H C, Li J, Wasilewski Z R, et al. Integrated Quantum Well Intersub-band Photodetector and Light Emitting Diode[J]. *Electronics Letters*, 1995, 31(10): 832-833.

(下转第 44 页)