

学校编码: 10384

分类号_____密级_____

学号: 19820061151782

UDC _____

廈門大學

碩 士 学 位 论 文

GaN 基 LED 的蒙特卡罗光子追踪法设计与模拟

Designs and simulations of GaN-based LED with Monte Carlo photon-tracing method

洪图

指导教师姓名: 康俊勇 教授

专业名称: 凝聚态物理

论文提交日期:

论文答辩时间:

学位授予日期:

答辩委员会主席: _____

评 阅 人: _____

2009 年 6 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹提交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密（ ），在 年解密后适用本授权书。

2、不保密（ ）

（请在以上相应括号内打“√”）

作者签名：

日期：2009年4月16日

导师签名：

日期：2009年4月16日

摘要

GaN 基 LED 具有节能、寿命长、体积小等优点，被视为下一代照明器件，受到人们广泛的关注。由于 LED 芯片折射率与空气折射率的巨大差别，使得光提取效率成为影响 LED 性能提高的最关键因素之一。因此，如何提高 LED 光提取效率成为近年来的研究热点。本文详细介绍了蒙特卡罗光子追踪法，并对程序流程进行深入的描述，通过计算机编程，模拟了不同结构与参数下正装与垂直结构 LED 出光，分析和探讨了其中物理机制。

虽然正装 LED 芯片性能并不突出，但由于其制作简单、成本低廉，因而在实际生产中仍有较多应用，对其出光进行研究具有一定的实际意义。本文通过模拟不同参数下正装 LED 芯片出光，探讨影响正装 LED 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递增的现象主要发生在低于透明导电薄膜折射率的区间；增加蓝宝石衬底的厚度将使光提取效率先显著提高而后逐渐平稳，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；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。

垂直结构 LED 具有电流分布均匀，散热效率高，可靠性高等优点。本文针对垂直结构 LED 设计了一种新型的树叶脉络状沟槽结构 (VGS)，目的是通过改变芯片形状来提高光提取效率。为验证该结构，我们模拟对比了几种不同结构的垂直 LED 芯片出光。结果显示，VGS 结构确实可以提高光提取效率。对于 $300\ \mu\text{m} \times 300\ \mu\text{m}$ 芯片，VGS 的光提取效率比 VNGS, IGS 和 SGS 分别提高了 20.5%，12.1% 和 7.2%。这主要由 VGS 结构具有较强的分割芯片的作用和一定的不规则性所致。我们通过绘制光提取效率分布图，对比分布图上面不同位置的点，以及模拟不同沟槽深度的光提取效率，较深入地分析和阐述了其物理机制。

关键词：GaN；光提取效率；发光二极管（LED）；蒙特卡罗光子追踪法

Abstract

With advantages such as energy saving, long lifetime, and small size, light-emitting diodes (LEDs) is considered as a revolutionary light source of next generation and attract wide attention. Due to the refractive index difference between chip and air, the light extraction efficiency (LEE) becomes an important factor of LED performance improvement and a research hotspot in recent years. In this article, the Monte Carlo photon-tracing method and the program flow are introduced detailedly. By computer simulation of face-up GaN-based light-emitting diodes (LEDs) and vertical LED with Monte Carlo photon-tracing method, and the mechanism of light extraction is discussed.

Although face-up LEDs do not have an excellent performance, but they still have a wide use because of simple manufacture and low cost. In this article, light extraction simulation of face-up GaN-based light-emitting diodes (LEDs) is presented, and the influence factors of LEE are studied. It is shown that the light extraction efficiency can be improved significantly by increasing refractive index of encapsulation material mainly when the refractive index of encapsulation material is smaller than the refractive index of transparent conductive thin film; when the sapphire thickness increases, the light extraction efficiency will increase rapidly first and then be saturated, so the light extraction improvement and heat dissipation of sapphire thickness should both considered during manufacturing process of LED; besides, transparent conductive thin film with low absorption coefficient and high reflectivity bottom reflector can also improve the light extraction efficiency significantly.

Vertical GaN-based LEDs have advantages in current injection, heat dissipation, reliability and so on. A venation-like groove structure (VGS) is proposed to improve light extraction efficiency (LEE) of vertical GaN-based light-emitting diode by reshaping the undoped GaN (U-GaN) layer. The light extraction characteristics of the venation-like groove structure are simulated and compared to other structures by the Monte Carlo photon-tracing method. It is found that VGS has advantages against other structures. At the chip size of $300\ \mu\text{m} \times 300\ \mu\text{m}$, the LEE of VGS is 20.5 %, 12.1 % and 7.2 % higher than that of VNGS, IGS and SGS, respectively. These advantages are mainly contributed to the partition and

deformation in VGS. Further, We study the mechanism through drawing LEE distribution patterns, comparing the LEE of different areas and simulating chips with different groove-depth.

Key Words : GaN; light extraction efficiency; light-emitting diodes; Monte Carlo photon-tracing method

厦门大学博硕士学位论文摘要库

目录

第一章 绪论	1
1.1 前言	1
1.2 半导体发光材料及 LED 发展历史	2
1.3 LED 的类型及原理	3
1.3.1 有源区结构	3
1.3.2 电流扩展模式	6
1.3.3 发光波长	7
1.4 LED 的优点及应用	7
1.4.1 LED 的优点	7
1.4.2 LED 的应用	8
1.5 影响 GaN 基 LED 性能提高的因素	11
1.6 提高光提取效率的方法	12
1.7 本文行文安排	17
第二章 模拟方法与程序流程	20
2.1 蒙特卡罗光线追踪方法	21
2.1.1 蒙特卡罗方法	21
2.3.2 光线追踪方法	22
2.4 模拟流程	23
2.5 编程工具	25
第三章 正装氮化镓基发光二极管芯片出光的蒙特卡罗方法模拟	29
3.1 模型构建	29
3.2 封装材料折射率对光提取效率的影响	30
3.3 蓝宝石衬底厚度对光提取效率的影响	32
3.4 透明导电薄膜吸收系数对光提取效率的影响	33
3.5 反射镜与电极反射率对光提取效率的影响	35
3.5 结论	36

第四章 垂直结构 LED 的电极沟槽结构设计	38
4.1 模型构建	39
4.2 U-GaN 层对光提取效率的影响	41
4.3 不同结构芯片光提取效率比较	42
4.4 光提取效率分布图分析	44
4.5 沟槽深度的影响	46
4.6 结论	46
第五章 总结与展望	49
本人硕士期间发表和完成的文章	51
致谢	52

第一章 绪论

1.1 前言

随着全球不可再生资源存量不断减少，温室效应不断增强，节约能源成为十分迫切的要求，为此世界各国先后投入大量的人力物力开展节能技术研究。照明在世界能源总消耗中占据了五分之一的巨大比重，研究新一代的节能光源成为了各国科学家争相研究的前沿课题。

在人类照明史上，发光二极管（LED）是继白炽灯和荧光灯后新一代光源，具有使用寿命长（10 万小时）、发热量低、响应速度快（纳秒级，可高频操作）、环保、安全、体积小、可平面封装等优点，成为了理想的新光源。鉴于 LED 在实际应用中的巨大潜力，世界各国纷纷推出针对 LED 的国家计划。日本于 1998 年率先推出了“21 世纪照明”计划，通过开发 GaN 高效蓝光和紫外 LED 技术，计划替代传统照明工具，减少能源消耗与二氧化碳排放。2000 年，为了在未来照明革命中领先其它竞争者，美国启动了“国家半导体照明研究项目”（National Research Program on Semiconductor Lighting），计划用 10 年时间，耗资 5 亿美元开发半导体照明。同年，欧盟和韩国亦分别制定了“彩虹计划”与“GaN 半导体开发计划”。2003 年，中国提出“国家半导体照明工程”，意在加强环境保护的同时，加速半导体照明技术和产业化发展，在照明革命中抢占一席之地，提升照明产业国际竞争力，走可持续发展之路。在国家的大力扶持下，上海、厦门、大连、南昌和深圳成为首批五个国家半导体照明产业化基地，LED 产业迅速发展。

发光效率是 LED 最关键的指标之一，制约发光效率提高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）。外量子效率为注入效率（P-N 结载流子与总电流的比值）、内量子效率（产生光子总数与注入电子—空穴对数的比值）、以及光提取效率三者的乘积。经多年的研究和开发，LED 的发光效率已经达到 249 lm/W，同等亮度下能耗不到白炽灯的十六分之一。目前，LED 的外延技术已十分成熟，内量子效率可高达 99%，提升的空间已不大[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 的光提取效率仍有较大的提升空间，成为人们研究的一个热点[1~4]。

1.2 半导体发光材料及 LED 发展历史

1907 年, H. J. Round 在一块碳化硅里第一次观察到电致发光现象, 从此拉开了人类开发另一种新型电光源的序幕。经过多年的研究, 1962 年美国通用电气公司发明了世界上第一支半导体发光二极管。早期的 LED 研究主要集中在 III 族的磷化物和砷化物三元混晶半导体。1965 年世界第一只商用 GaAsP LED 问世, 发光效率为 0.1 lm/W。1968 年利用半导体掺杂工艺, 提升 GaAsP LED 的发光效率至 1 lm/W, 并且能够发出红光、橙光和黄光。1971 年, 第一支绿光 LED 问世, 其发光效率亦达到 1 lm/W。到了 80 年代, GaAsP 和 AlGaAs 半导体红光 LED 的光效达到了 10 lm/W。随着半导体技术的不断发展, 具有 P 型和 N 型电阻率低、晶体质量优良、直接跃迁、发光复合几率大、效率高优点的四元 AlInGaP 半导体逐渐占据了主流。90 年代, 光效可达 100 lm/W, 实现了超高亮度实用化[5]。

在解决了红黄光波段半导体 LED 问题后, 由于全色显示的需要, 制作出可靠性高、寿命长的蓝光 LED 成了研发的热点。根据半导体电致发光的机制, 半导体禁带宽度决定了其激发出来的光波波长, 禁带宽度越大其激发出来的波长就越短。采用磷化物和砷化物混晶半导体, 禁带宽度小于 2 eV, 不能实现蓝光 LED 的制备。能够有效发蓝光的材料非宽禁带半导体莫属。宽禁带半导体的禁带宽度大于 2 eV, 主要有 ZnO、SiC、GaN 等。早期的研究一直集中于 II-VI 族的 ZnSe 和 IV 族的 SiC 半导体。虽然这两种半导体禁带较宽, 且具有直接带隙, 但是由于自补偿作用的存在, 达不到重掺杂, 难以制成好的 P-N 结, 因此注入效率较低。

GaN 半导体的禁带宽度约为 3.4 eV, 通过与 InN, AlN 等材料组成混晶, 可在 0.7~6.3 eV 之间调节, 发光波长覆盖整个可见光谱。由于难于得到晶格匹配的高质量单晶衬底, GaN 多生长在异质衬底上, 如蓝宝石或 SiC。外延层和蓝宝石和 SiC 衬底的晶格失配分别高达 16 %和 3.5 %, 使得 GaN 外延层通常处于高应力状态下, 因此早期生长的 GaN 外延片表面光洁度较差, 且经常有裂纹。上世纪八十年代末, 日本科学家 I. Akasaki 引入了低温缓冲层技术, 在蓝宝石衬底上实现了表面无龟裂、背景载流子浓度低、载流子迁移率高的 GaN 单晶膜生长。而后, 成功地获得了 P 型 GaN 半导体。日亚公司的 S. Nakamura 改用 GaN 作缓冲层, 获得了如镜面的表面和更优越的电学性能, 并制备出了第一支可实用化 GaN 蓝光 LED, 使全色显示与白光照明成为可能, LED 的应用开始

进入飞速发展的阶段。

1.3 LED 的类型及原理

LED 主要功能结构为 P-N 结。在 P-N 结上加上正向电压，使 P 和 N 区中空穴和电子互相扩散进入彼此区域，在扩散过程中空穴和电子不断复合，并以光子的形式释放出能量。

1.3.1 有源区结构

就有源区结构而言，LED 可以分成三种：同质 P-N 结、异质结和量子阱 LED[9]。

同质结

用同一种半导体制成的 P-N 结叫同质结。早期 LED 有源区均采用同质 P-N 结结构，如 1970 年代的 GaP、GaAsP 同质结红、黄、绿色 LED。当 P-N 结处于平衡时，存在一定的势垒区，其能带如图 1-1 所示。如加一正向偏压，由于势垒区载流子浓度很小，电阻很大，外加电压基本降落在势垒区，削弱了势垒区的内建电场，减小了势垒。载流子的扩散和漂移之间的平衡被打破，扩散流大于漂移流，即产生电子由 N 区注入 P 区和空穴由 P 区注入 N 区的净扩散流，如图 1-1 所示。进入 P 区的电子和进入 N 区的空穴均为非平衡少数载流子，其扩散过程中将与多数载流子复合而发光，经过比扩散长度大几倍的距离后，全部被复合。由于同质 P-N 结非平衡载流子分布范围较宽，因此其内量子效率比较低。

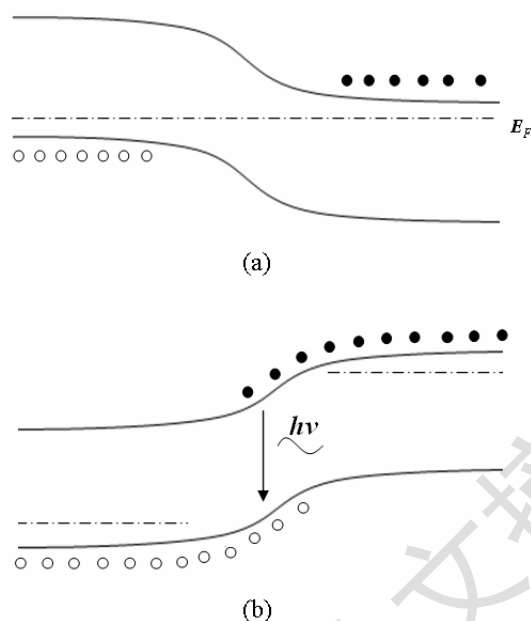


图 1-1 同质 P-N 结注入发光能带图：(a) 平衡状态 P-N 结；(b) 导通状态 P-N 结

异质结

由两种不同的半导体材料形成的结称异质结。根据两种材料的导电类型同异，异质结可以分为反型异质结和同型异质结，在 LED 器件中我们主要考虑反型异质结。而根据结的数量，异质结又可分为单异质结和双异质结等。

由于内建电场的存在及 P 区和 N 区的禁带宽度不等，零偏压下反型单异质结呈现如图 1-2 (a) 所示的能带形状（图中以 P 区的禁带宽度比 N 区窄为例）。加上正向偏压后，N 区导带和价带相对于 P 区提高，但由于 P 区和 N 区禁带宽度不同，使电子空穴扩散的势垒不同，受如图 1-2 (b) 所示价带顶凹口势垒的影响，P 区空穴在凹口处受阻堆积，而 N 区不存在势垒，电子可顺利扩散到 P 区，与 P 区空穴复合，并以光子的形式释放出能量。由于凹口处堆积了浓度较高的空穴，因此电子空穴复合几率比同质结高，这是单异质结相对于同质结的一大优点。此外，P 区和 N 区禁带宽度不同还导致了禁带较宽的区域成为注入源（图中的 N 区），而禁带宽度较小的区域（图中 P 区）成为发光区，发光区 (E_{gP} 较小) 发射的光子，其能量 $h\nu$ 小于 E_{gN} ，进入 N 区后不会引起本征吸收，即禁带宽度较大的 N 区对这些光子是透明的。单异质结只能限制一种类型的载流子，在单异质结的基础上再加一个异质结形成双异质结，能够将电子和空穴都限制在

一个区域，其载流子复合几率比单异质结更高，性能更好。

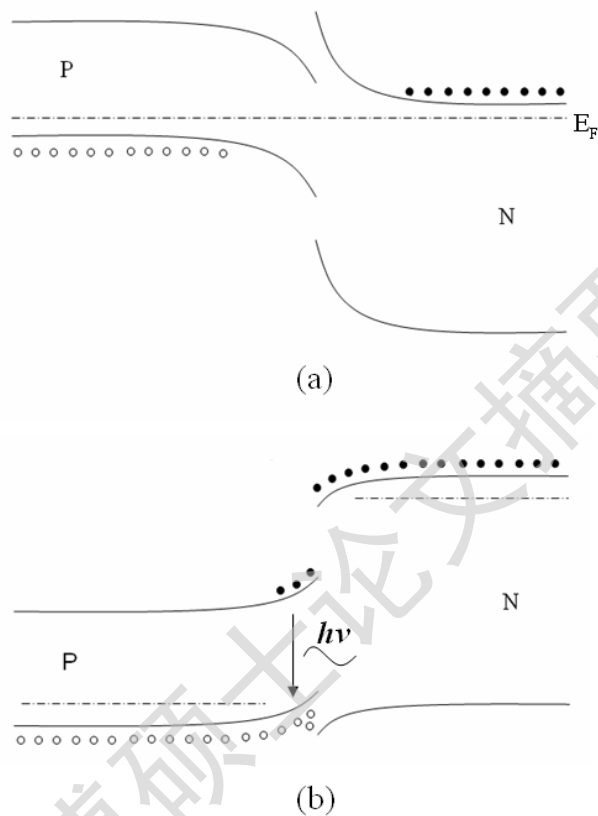


图 1-2 异质结注入发光能带图：(a) 平衡状态异质结；(b) 导通状态异质结

量子阱

虽然双异质结可以同时限制电子空穴在一个固定区域，但由于这个区域较宽，使电子空穴浓度最高的位置不在同一点上，波函数交叠少，影响复合几率的提高。为此，人们将电子空穴限制区做得很薄，使载流子波函数更多地交叠，提高复合几率。由于这种结构的尺度极小，导致显著的量子效应，因此称为量子阱，其能带图如图 1-3 所示。随着异质外延极薄材料技术的发展，量子阱等人工设计的材料结构开始应用于半导体发光。在禁带较宽的 GaN 半导体上异质外延一层极薄的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 阱层，然后再异质外延较厚的 GaN 垒层，形成量子阱结构。当势阱沿 z 方向很窄时，电子在 z 方向被局限在几个到几十个原子层范围的量子阱中，能量发生量子化，产生分立量子能级。当外加电流注入时，电子和空穴发生迁移，掉入势阱中的载流子处于量子能级上。由于阱中量子

能级态密度为常数,使得基态上电子和空穴浓度比体同质和异质结构导带底和价带顶的有大幅度提高,加上电子和空穴均限域于很窄的空间里,电子和空穴复合跃迁辐射发光几率明显增大。

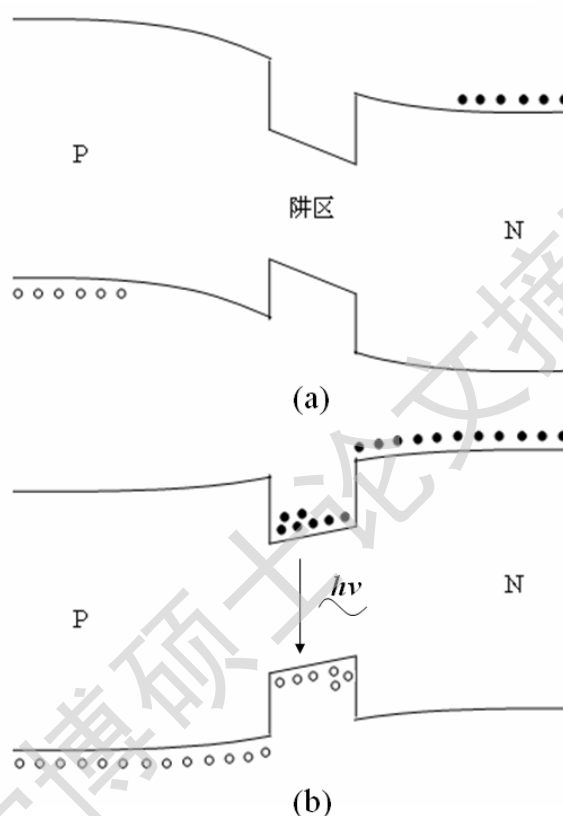


图 1-3 量子阱示意图: (a) 平衡状态量子阱; (b) 导通状态量子阱

1.3.2 电流扩展模式

就电流扩展模式而言,LED 芯片有两种基本结构,横向(Lateral)和垂直(Vertical)结构。正装 LED 芯片和倒装 LED 芯片都属于横向结构,其特点是正负两个电极在 LED 芯片的同一侧,电流在 N 型和 P 型层中横向流动不等的距离。横向结构 LED 优点是制作相对于垂直结构 LED 来得简单,有利于大规模生产和降低产品单价,但其缺点也显而易见。在横向结构 LED 芯片中,由于 N 型 GaN 层和 P 型层的掺杂浓度不能太高,因此横向电阻无法忽略,这就使靠近 N 型电极的台面边缘电流密度大于其它地方,导致了电流拥堵效应,影响器件有源区发光的均匀性,可靠性等[6]。

垂直结构可以克服横向结构的弱点。对于蓝宝石衬底 GaN 基 LED，人们利用 GaN 界面处对激光强烈吸收的特点，选择光子能量大于 GaN 带隙而小于蓝宝石带隙的短波长激光辐照蓝宝石衬底。激光透过蓝宝石后在蓝宝石和 GaN 界面处产生强吸收，使得 GaN 发生热分解，生成氮气和低熔点的金属镓，通过熔化镓实现 GaN 外延层和蓝宝石衬底的分离。将激光剥离 (Laser Lift-off) 后的 GaN 薄膜键合 (Bonding) 到其它导电衬底上，使得 N 电极和 P 电极位于器件上下两侧，制成垂直结构 LED。

垂直结构 LED 的出现不仅解决了器件中的电流拥挤问题，而且由于垂直结构使用导热性较强的材料如 Cu、Si 代替了导热性能很差的蓝宝石，使得 LED 的散热性能得到了大幅提高。垂直结构 LED 的优异特性使其受到广泛的重视[7, 8]。本文模拟分别选择常见的正装与垂直结构 LED 为对象。

1.3.3 发光波长

LED 裸芯片发出的光通常为单色光，可分为多种不同波长（如红光、黄光、绿光、蓝光等）。而要实现白光视觉效果，至少需两种光的混合，如二波长发光（蓝色光+黄色光）、三波长发光（蓝色光+绿色光+红色光）的模式。对于一般照明，已有两种方法成功地应用于白光器件。第一种利用“蓝光技术”与荧光粉配合形成白光，由蓝光 LED 和荧光粉（如：钇铝石榴石等）封装在一起，当荧光粉受蓝光激发后发出黄色光，蓝光和黄色光混合形成白光。采用不同的荧光粉可以发出不同色温的白光，可以适应不同场合照明的需要。第二种为多种单色光混合，采用不同色光的芯片封装在一起，通过各色光混合而产生白光。使用这种方法的灯具可以通过单片机控制来改变发光的颜色，因此可作为户外显示屏、代替霓虹灯等等。近年来，紫外 LED 逐渐进入商业化，这就为白光 LED 带来一种新的模式。由于紫外光的能量比蓝光要高，可以激发三基色荧光粉，在更宽光谱范围获得白光，LED 的显色指数可进一步增大。

1.4 LED 的优点及应用

1.4.1 LED 的优点

LED 的工作原理决定了其优点，主要包括：

1) 能耗低

目前白光 LED 发光效率在实验室水平上已经达到 249 lm/W，其商品也超过了 100

lm/W，远远高于传统灯具。随着技术的不断发展，LED 的发光效率还将进一步提高。

2) 寿命长

LED 具有 10 万个小时的使用寿命，而白炽灯只有 1500 个小时。在可靠性要求高，无法经常更换光源的地方，LED 是一个极佳的选择。

3) 体积小

芯片尺寸很小，可平面封装，易于开发轻薄产品例如液晶显示器、投影仪等。

4) 耐振动

没有钨丝、玻璃等易损坏部件，封装后的 LED 具有耐震、耐冲击不易破的特点。

5) 色纯度高，色域广

LED 的色纯度很高，有很强的色彩表现力，因而广泛应用于户外大型全彩显示屏。

6) 响应速度快

LED 响应速度很快，用 LED 做的汽车煞车灯响应时间为 60 ns，可以给驾驶员更多的反应时间，提高了行车安全。

7) 环保

无汞无铅，废弃物可回收，没有污染。

8) 使用安全

LED 发热量低，可安全触摸，且一般在低电压（6~24 V）、小电流下工作，属弱电级工作器件，有较好的电气安全性能。

1.4.2 LED 的应用

作为革命性的新一代光源，LED 在诸多领域有着广泛的应用：

1) 普通照明

由于 LED 在能量利用效率上的巨大优势，使其成为替代传统灯具的最佳候选。美国、日本等国家和台湾地区分别对 LED 照明效益进行了预测：美国 55 % 白炽灯及 55 % 的日光灯被 LED 取代，每年节省 350 亿美元电费，每年减少 7.55 亿吨二氧化碳排放量。日本 100 % 白炽灯换成 LED，可减少 1~2 座核电厂发电量，每年节省 10 亿公升以上的原油消耗。中国作为发电大国，有 80 % 为火力发电，燃烧大量不可再生能源，排放大量的温室气体。如果使用 LED 替代 1/3 的白炽灯，每年即可节省用电 1000 亿千瓦时，约折合标准煤 4000 万吨，相当于 4 个千万吨级特大煤矿的年产量。

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库