

## ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ III-НИТРИДОВ

С.С. Суслов<sup>1\*</sup>, К.А. Виноградова<sup>2</sup>, В.Е. Бугров<sup>1,3</sup>, М.А. Одноблюдов<sup>1</sup>, А.Е. Романов<sup>1-3</sup>

<sup>1</sup> Группа компаний «Оптоган», Таллинское шоссе 206, Санкт-Петербург, 198205, Россия

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,

ул. Политехническая 26, Санкт-Петербург, 194021, Россия

<sup>3</sup>Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики,

Кронверкский пр. 49, Санкт-Петербург, 197101, Россия

\*e-mail: sergey.suslov@optogan.com

**Аннотация.** Рассматривается задача параметрической оптимизации свойств нитридного светоизлучающего чипа в рамках самосогласованного электро–тепло–светового подхода. Представляются рассчитанные зависимости мощности излучения, КПД чипа, картины растекания тока при контролируемых изменениях в геометрии электродов. Решение задачи оптимизации предсказывает более 8 % прирост КПД устройства. Моделирование выполнено с использованием оригинального программного обеспечения, основанного на методе конечных объемов и методе трассировки лучей.

### 1. Введение

Роль светодиодов в общем освещении становится все более очевидной [1-3]. Дальнейший прогресс в этом направлении требует проведения новых фундаментальных и прикладных исследований в области физики и технологии светодиодных устройств [2, 4]. Для уменьшения числа дорогостоящих и длительных экспериментов разумно использовать аналитические и численные методы моделирования процессов изготовления и эксплуатации светодиодов [2, 4]. Важнейшей задачей в этой области является модельный анализ влияния формы электродов на растекание тока в светодиодном чипе и на вывод излучения из него. Обещающие результаты на пути решения данной задачи были получены в течение последнего десятилетия [5–13]. Например, Ebong и др. [5] и Hwang и др. [6] представили трехмерную (3D) модель численного анализа светодиодного чипа и проанализировали различные геометрические формы электродов. Всестороннее исследование геометрии контакта в светодиоде, выращенном на изолирующей подложке, представлено Sheu и др. [7]. Позднее Chen и др. [8] провели электрооптический анализ GaN светодиодных чипов, используя метод трассировки лучей. Исследование зависимости тепловых и электрических свойств от размера площади p–контакта в вертикальных чипах высокой мощности, созданных на основе GaN, проведенное Hwu и др. [9], показало, что увеличение этой площади значительно сокращает потребляемую мощность и нагрев устройства, но в то же время, уменьшает КПД светодиода из-за высоких потерь света. В последнее время, сообщалось о смешанном электро–тепло–световом моделировании светодиодов [11-13]. Богданов и др. изучили вертикальный чип, рассчитанный на

потребление большого тока, и улучшили его характеристики путем усовершенствования p-контакта [11]. Wang и др. сравнили две различные формы электродов традиционных чипов и показали, что геометрия электродов оказывает значительное влияние на эффективность устройства [12]. В работе [13] представлено моделирование световых, электрических и тепловых параметров светодиода, однако одновременный циклический учет поглощения рожденных в активной области лучей света на формирование тепла в структуре и его влияния на электрические и световые характеристики, отсутствует. Таким образом, можно заключить, что самосогласованного электро-тепло-светового параметрического моделирования до сих пор не проводилось.

В представленной работе лучи света, созданные в активной области, поглощаясь в каждом слое материала чипа, учитываются в качестве дополнительного источника тепла в тех же ячейках сетки моделирования. Созданное тепло влияет на тепловые и электрические характеристики чипа и сказывается на генерируемом излучении. Задача параметрической оптимизации циклически решается до стабилизации оптических, электрических и тепловых характеристик в рассматриваемой системе.

## 2. Моделируемая система

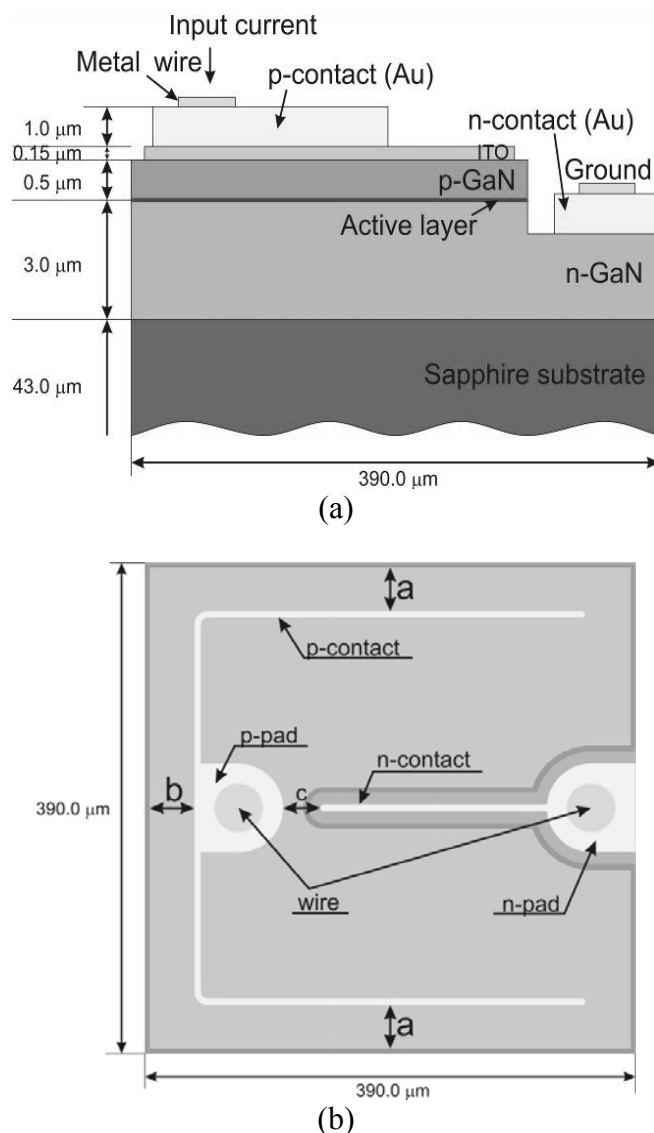
Традиционная конструкция светодиода предполагает размещение p- и n-контактов на одной и той же стороне чипа, что ведет к очень неоднородному растеканию тока и большим потерям света за счет его поглощения на поверхностях контактов. Детальное исследование и оптимизация расположения токопроводящих контактов дают возможность уменьшить указанные потери.

Моделируемый в настоящей работе традиционный InGaN/GaN светодиодный чип схематически представлен на Рис. 1.

Трехмерное (3D) самосогласованное электро-тепло-световое моделирование проводится для различных значений параметров  $a$ ,  $b$ ,  $c$  (Рис. 1a,b) геометрии электродов: сначала фиксируются два параметра из трех, при этом определяется наилучшее значение третьего. Дальнейшие расчеты определяют лучшие значения двух других. При проведении расчетов в рамках 3D самосогласованного электро-тепло-светового моделирования в качестве главного значения оптимизации при параметрическом изменении геометрии контактов предложено использовать КПД устройства. Расчеты в подобной постановке задачи ранее не проводились.

Для проведения моделирования каждый слой светодиодного чипа представляется в виде неструктурированной сетки, состоящей из призматических ячеек, что является составной частью метода конечных объемов [14]. Входными данными для моделирования являются фиксированное значение прямого тока, контактные сопротивления (в случае контакта слоев различных материалов), слоевые сопротивления (сопротивления между ячейками сетки в слое одного и того же материала) и граничные условия. Работа программы построена так, что сначала для заданной геометрии электродов и установленного приблизительно сопротивления активной области, рассчитывается распределение тока в каждой ячейке сетки и разность потенциалов между ячейками. Процедура циклически повторяется до тех пор, пока в результатах рассчитанного значения напряжения активной области не перестанут появляться изменения. После этого рассчитывается оптическая мощность излучения, и в то же время, формируется база данных для расчета распределения теплового поля, которое в свою очередь, создается двумя источниками — теплом за счет протекания тока и теплом, за счет поглощения доли испускаемого активной областью света материалами слоев. Здесь также обеспечивается циклическость расчетов, поскольку создаваемое тепло влияет на значения тока и оптическую мощность.

Решением циклического расчета является достижение постоянных значений рассчитываемых величин — падения напряжения на активной области, мощности излучения, картины растекания тока и тепла.



**Рис. 1.** Схематичное изображение светодиодного чипа GaN:  
 (а) вид сбоку; указанные значения использованы в моделировании;  
 (б) вид сверху:  $a$ ,  $b$ ,  $c$  – параметры, изменяемые при моделировании.

В Таблице I даются значения используемых в моделировании параметров материалов.

Определение растекания тока в слоях, за исключением активной области, осуществляется на основе закона Ома:

$$\sigma \cdot E = J. \quad (1)$$

Здесь  $\sigma$  — удельная электрическая проводимость,  $E$  — напряженность поля,  $J$  — плотность тока. Удельная электрическая проводимость  $\sigma$  связана со слоевым сопротивлением  $r_l$  и контактным сопротивлением  $r_c$  выражениями  $\sigma = 1/(r_l \cdot t_l)$  и

$\sigma = l_j/r_c$ , соответственно, где  $t_l$  — толщина слоя, которая показана на Рис. 1а, и  $l_j$  — расстояние между центрами  $j$  и  $j+1$  ячеек сетки моделирования в материале.

Таблица I. Параметры материалов, используемые в электрических, тепловых, световых расчетах.

Материал	Толщина слоя, $\mu\text{m}$	Слоевое сопротивление, $\Omega/\square$	Контактное сопротивление, $\Omega \cdot \mu\text{m}^2$	Теплопроводность, $\text{W/m} \cdot \text{K}$	Коэфф. преломления	Коэфф. поглощ., $\mu\text{m}^{-1}$
ITO	0.15	200	-	11	-	-
n-GaN	3	20	-	130	2.4	$10 \cdot 10^{-3}$
p-GaN	0.5	$170 \cdot 10^3$	-	130	2.4	$10 \cdot 10^{-3}$
золото	1.0	43.48	-	317	-	-
сапфир	43.0	-	-	34	1.78	$1 \cdot 10^{-3}$
p-контакт/ ITO	-	-	$1.0 \cdot 10^3$	-	-	-
ITO / p-GaN	-	-	$2.0 \cdot 10^5$	-	-	-
n-GaN / n-контакт	-	-	$1.0 \cdot 10^3$	-	-	-
воздух	-	-	-	-	1.0	-

Активная область формируется гетероструктурой InGaN/GaN и задается в виде слоя материала между слоями p-GaN и n-GaN с нелинейной контактной проводимостью  $q_{actj} = J_{actj}/V_{actj}$ , где индекс  $j$  соответствует ячейке на границе раздела,  $V_{actj}$  — падение напряжения,  $J_{actj}$  — плотность тока. Плотность тока  $J_{actj}$  определяется из уравнения Шоккли [2]:

$$J_{actj} = J_0 \cdot [\exp(q \cdot V_{actj}/(n \cdot k \cdot T)) - 1], \quad (2)$$

где  $J_0$  — плотность тока насыщения,  $n$  — фактор неидеальности,  $k$  — постоянная Больцмана,  $q$  — элементарный заряд,  $T$  — абсолютная температура.

Плотность тока насыщения определяется на основе выражения:

$$J_0 = A \cdot \exp(-E_g/k \cdot T), \quad (3)$$

где  $A$  — множитель перед экспонентой и  $E_g = 2,73 \text{ eV}$  — ширина запрещенной зоны. Фактор неидеальности и множитель перед экспонентой —  $3.1$  и  $10^{24} \text{ A}/\mu\text{m}^2$ , соответственно. Граничными условиями являются: электрический ток на p-площадке непосредственно под проводом задается равным  $70 \text{ mA}$ , падение напряжения на n-площадке непосредственно под проводом задается равным  $0 \text{ V}$  (Рис. 1а), все другие поверхности считаются электрически изолированными.

Для расчета переноса тепла используется уравнение Фурье:

$$Q = -\gamma \cdot \text{grad } T, \quad (4)$$

где  $Q$  — вектор плотности теплового потока,  $\gamma$  — коэффициент теплопроводности,  $T$  — температура.

Источником тепла в каждой ячейке сетки моделирования является сумма мощности тепловых потерь согласно закону Джоуля–Ленца и мощности поглощенного слоями материала света. Нагрев активного слоя вычисляется из следующего уравнения:

$$Q_{actj} = V_{actj} \cdot I_{actj} - P_{radj}, \quad (5)$$

где  $P_{radj}$  — мощность сгенерированного светового излучения.

Граничным условием является также значение теплового потока, удаляемого с нижней поверхности сапфировой подложки  $Q_{sapphire} = \alpha \cdot (T_{env} - T_j)$ , где  $\alpha = 40000 \text{ W/m}^2\text{K}$  [9] — коэффициент теплоотдачи и  $T_{env} = 293 \text{ K}$  — комнатная температура.

Метод трассировки лучей применяется для моделирования вывода светового излучения на той же сетке, на которой решаются уравнения переноса заряда и переноса тепла. Лучи запускаются из активной области с энергиями, которые определяются из уравнения [2]:

$$P_{radj} = \eta_{int} \cdot J_{actj} \cdot hv/q, \quad (6)$$

где  $hv = 2.73 \text{ eV}$  — энергия фотона,  $q$  — элементарный заряд,  $\eta_{int} = 0.8$  — внутренняя квантовая эффективность,  $J_{actj}$  — плотность тока в ячейке  $j$  активного слоя.

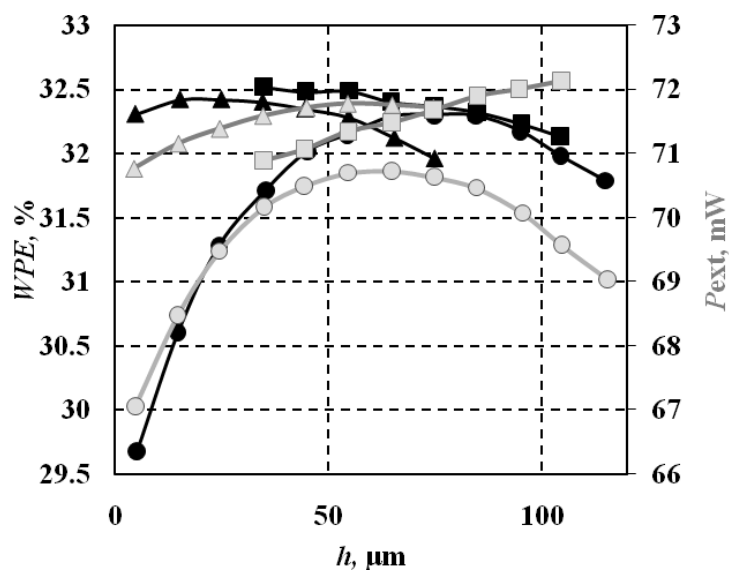
Потери мощности лучей света вычисляются из закона Бугера–Ламберта–Бера:

$$P = P_0 \cdot \exp(-\alpha \cdot l), \quad (7)$$

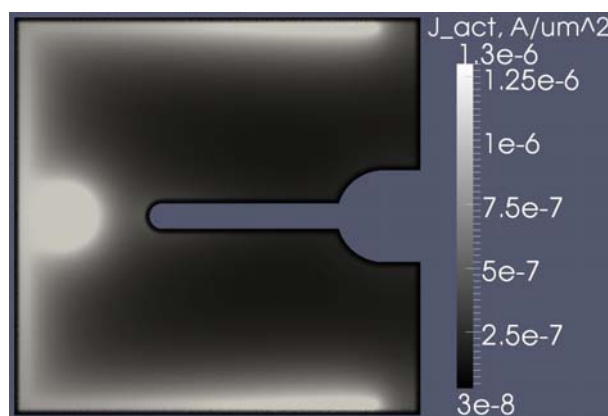
где  $P_0$  — начальная мощность луча, которая получена из (5),  $\alpha$  — коэффициент поглощения,  $l$  — расстояние, которое проходит свет через материал. В каждой ячейке сетки моделирования энергия поглощенных лучей учитывается в источнике тепла. Прозрачный проводящий слой ИТО смоделирован как плоскость со смешанной рассеивающей схемой: 50 % света отражается и преломляется по законам Френеля и 50 % света рассеивается по закону косинуса Ламберта. Нижняя поверхность сапфира принимается в качестве зеркала с отражательной способностью в 90 %. Металлические контакты в разработанной модели представляются в виде абсолютных поглотителей света, в других вариантах модели возможно рассмотрение отражающих контактов.

### 3. Моделирование и результаты

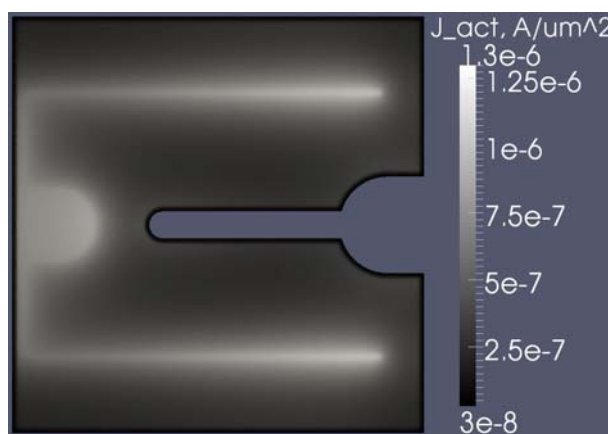
Оптимизация геометрии контакта начиналась с параметра  $a$  при фиксированных параметрах  $b = 5 \text{ }\mu\text{m}$ ,  $c = 60 \text{ }\mu\text{m}$ . На Рис. 2 кружками предоставляются зависимости КПД светодиодного чипа, определяемый из выражения  $WPE = P_{ext} / (V_a I_a)$  (*wall plug efficiency*), и мощности излучения в зависимости от расстояния  $a$ . При сближении полос р- и п-контакта мощность излучения  $P_{ext}$  достигает максимального значения на расстоянии  $a = 65 \text{ }\mu\text{m}$  благодаря меньшему количеству потерь света на поверхности р-контакта, в то время как максимум КПД наблюдается при  $a = 75 \text{ }\mu\text{m}$ . Причина, по которой КПД имеет максимум при  $a = 75 \text{ }\mu\text{m}$ , а не при  $a = 65 \text{ }\mu\text{m}$ , можно объяснить более высокой скоростью падения прямого напряжения по сравнению со скоростью изменения выхода света. На Рис. 3 демонстрируется картина растекания тока: при  $a = 5 \text{ }\mu\text{m}$  (Рис. 3а) имеет место значительное сгущение тока под металлическими токоведущими полосками р-контакта, что является причиной более низкого вывода света, по сравнению с картиной растекания тока при  $a = 65 \text{ }\mu\text{m}$  (Рис. 3б).



**Рис. 2.** Зависимость коэффициента полезного действия  $WPE$  (чёрный цвет) и мощности выходящего света  $P_{ext}$  (серый цвет) от характерных геометрических параметров электродов  $a$  (кружки),  $b$  (треугольники) и  $c$  (квадраты).



(a)



(b)

**Рис. 3.** Распределение плотности тока  $J_{act}$  в активной области для чипа: (a) с параметром моделирования  $a = 5 \mu\text{m}$ ; (b) с параметром моделирования  $a = 65 \mu\text{m}$ .

На основании графиков Рис. 2 оптимальным значением параметра  $a$  считается  $65 \mu\text{m}$ . Изменения в характеристиках чипа, связанные с параметром  $b$  при фиксированном значении  $a = 65 \mu\text{m}$ , изображены на Рис. 2 треугольниками. Возрастание расстояния  $b$  приводит к увеличению вывода света за счет того, что ток частично выводится из-под площадки р-контакта, но в то же самое время быстро растет напряжение, что негативно сказывается на КПД. Оптимальным значением  $b$  выбирается  $25 \mu\text{m}$ .

С уменьшением расстояния  $c$  (на Рис. 2 зависимости  $WPE$  и  $P_{\text{ext}}$  от расстояния  $c$  обозначены квадратами) увеличивается мощность излучения чипа, но при этом скорость роста напряжения выше. Поэтому КПД чипа последовательно уменьшается с ростом расстояния  $c$ . Оптимальным значением параметра  $c$  выбирается  $75 \mu\text{m}$ , что соответствует более однородному распределению тока.

#### 4. Заключение

Таким образом, при заданных граничных условиях и параметрах материалов структуры чипа, оптимальной формой электродов является форма со значениями параметров моделирования чипа:  $a = 65 \mu\text{m}$ ,  $b = 25 \mu\text{m}$ ,  $c = 75 \mu\text{m}$ . Для рассмотренной геометрии электродов размещение полос р-контакта вдали от краев чипа является предпочтительным для лучшего растекания тока. Также можно порекомендовать следующее: полоса п-контакта должна быть близко расположена к площадкам р-контакта для уменьшения удельного сопротивления чипа, или же, полоса п-контакта может быть сделана более короткой для увеличения вывода света.

Тенденции характеристик, которые демонстрируются на Рис. 2 и Рис. 3а,б, свидетельствуют о том, что выполнение трехмерного самосогласованного электро-тепло-светового моделирования является важным инструментом для того, чтобы найти оптимальную форму электродов. В частном случае желание уменьшить только прямое напряжение или увеличить только выход света путем изменения формы электродов не обязательно приведет к росту КПД. Важно, что расчеты следует выполнять при фиксированных электрических, тепловых и оптических параметрах чипа для того, чтобы оценить влияние изменения только геометрии контактов на расчетные характеристики.

Можно ожидать, что в случае работы чипов на более высоких токах, роль геометрии электродов станет еще более значимой. Таким образом, оптимизация контактов является необходимым условием для проектирования качественных, эффективных и надежных светодиодных устройств, тем более что при оптимизировании работы программы на основе задаваемых электрических и световых параметров можно будет рассчитывать наилучшую форму электродов.

*Авторы благодарят профессора О.В. Константинова за полезные обсуждения полученных результатов, а также вопросов, связанных с теоретическим анализом эффекта падения световой эффективности «droop effect» в светодиодных полупроводниковых структурах.*

#### Литература

- [1] E.F. Schubert, J.K. Kim // *Science* **308** (2005) 1274.
- [2] E.F. Schubert, *Light-Emitting Diodes* (Cambridge University Press, UK, 2006).
- [3] R. Haitz, J.Y. Tsao // *Physica Status Solidi A* **208** (2011) 17.
- [4] A.I. Zhmakin // *Physics Reports* **498** (2011) 189.
- [5] A. Ebong, S. Arthur, E. Downey, X.A. Cao, S. LeBoeuf, D.W. Merfeld // *Solid-State Electronics* **47** (2003) 1817.

- [6] S. Hwang, J. Shim // *IEEE Transactions Electron Devices* **55(5)** (2008) 1123.
- [7] G.J. Sheu, F.S. Hwu, J.C. Chen, J.K. Sheu, W.C. Lai // *Journal of the Electrochemical Society* **155(10)** (2008) H836.
- [8] J.C. Chen, G.J. Sheu, F.S. Hwu, H.I. Chen, J.K. Sheu, T.X. Lee, C.C. Sun // *Optical Review* **16** (2009) 213.
- [9] F.S. Hwu, J.C. Chen, S.H. Tu, G.J. Sheu, H.I. Chen, J.K. Sheu // *Journal of the Electrochemical Society* **157(1)** (2010) H31.
- [10] S. Huang, H. Wu, B. Fan, B. Zhang, G. Wang // *Journal of Applied Physics* **107** (2010) 054509.
- [11] M.V. Bogdanov, K.A. Bulashevich, O.V. Khokhlev, I.Yu. Evstratov, M.S. Ramm, S.Yu. Karpov // *Physica Status Solidi C* **7** (2010) 2123.
- [12] P. Wang, W. Wei, B. Cao, Z. Gan, S. Liu // *Optic & Laser Technology* **42** (2010) 737.
- [13] M.V. Bogdanov, K.A. Bulashevich, I.Yu. Evstratov, A.I. Zhmakin, S.Yu. Karpov // *Semiconductor Science and Technology* **23** (2008) 125023.
- [14] H.K. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, England, 2007).

## PARAMETRIC MODELING OF LIGHT EMITTING STRUCTURES BASED ON III-NITRIDES

S.S. Suslov<sup>1\*</sup>, K.A. Vinogradova<sup>2</sup>, V.E. Bougrov<sup>1,3</sup>, M.A. Odnoblyudov<sup>1</sup>, A.E. Romanov<sup>1-3</sup>

<sup>1</sup>Optogan Group, Tallinskoe shosse 206, St. Petersburg, 198205, Russia

<sup>2</sup>Ioffe Physical Technical Institute RAS, Polytekhnicheskaya 26, St. Petersburg, 194021, Russia

<sup>3</sup>St. Petersburg National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics,  
Kronverkskiy pr. 49, St. Petersburg, 197101, Russia

\*e-mail: sergey.suslov@optogan.com

**Abstract.** We consider the task of parametric optimization of the properties for nitride semiconductor light emitting chip. The solution is given in the framework of the self-consistent electrical/thermal/optical approach. Dependences of radiation power, chip wall plug efficiency (WPE) and current spreading are presented for varying geometry of chip electrodes. The optimization procedure predicts more than 8 % increase in WPE. Original software based on finite volume and ray tracing analysis was used in simulation.

### References

- [1] E.F. Schubert, J.K. Kim // *Science* **308** (2005) 1274.
- [2] E.F. Schubert, *Light-Emitting Diodes* (Cambridge University Press, UK, 2006).
- [3] R. Haitz, J.Y. Tsao // *Physica Status Solidi A* **208** (2011) 17.
- [4] A.I. Zhmakin // *Physics Reports* **498** (2011) 189.
- [5] A. Ebong, S. Arthur, E. Downey, X.A. Cao, S. LeBoeuf, D.W. Merfeld // *Solid-State Electronics* **47** (2003) 1817.
- [6] S. Hwang, J. Shim // *IEEE Transactions on Electron Devices* **55(5)** (2008) 1123.
- [7] G.J. Sheu, F.S. Hwu, J.C. Chen, J.K. Sheu, W.C. Lai // *Journal of the Electrochemical Society* **155(10)** (2008) H836.

- [8] J.C. Chen, G.J. Sheu, F.S. Hwu, H.I. Chen, J.K. Sheu, T.X. Lee, C.C. Sun // *Optical Review* **16** (2009) 213.
- [9] F.S. Hwu, J.C. Chen, S.H. Tu, G.J. Sheu, H.I. Chen, J.K. Sheu // *Journal of the Electrochemical Society* **157(1)** (2010) H31.
- [10] S. Huang, H. Wu, B. Fan, B. Zhang, G. Wang // *Journal of Applied Physics* **107** (2010) 054509.
- [11] M.V. Bogdanov, K.A. Bulashevich, O.V. Khokhlev, I.Yu. Evstratov, M.S. Ramm, S.Yu. Karpov // *Physica Status Solidi C* **7** (2010) 2123.
- [12] P. Wang, W. Wei, B. Cao, Z. Gan, S. Liu // *Optic & Laser Technology* **42** (2010) 737.
- [13] M.V. Bogdanov, K.A. Bulashevich, I.Yu. Evstratov, A.I. Zhmakin, S.Yu. Karpov // *Semiconductor Science and Technology* **23** (2008) 125023.
- [14] H.K. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Pearson Education Limited, England, 2007).