

Monte Carlo Simulation for the Light-Emitting Diode

Tiecheng Gao¹, Yanjin Ai²

¹Engineering Research Center of Solid-State Lighting (Engineering Research Center of High Power Solid State Lighting Application System, Ministry of Education; Tianjin Solid State Lighting Technic Engineering Center), School of Information and Communication Engineering, Tianjin Polytechnic University, Tianjin, China

²College of Information and Electronics Engineering, Tianjin professional college, Tianjin, China

Email: gaotiecheng@tjpu.edu.cn

Abstract: LED in technical for us, with the application of LED. Basing on Monte Carlo method, the photons output distributions of light-emitting diode are simulated in the paper. The essential idea is that by tracing the photon in the chip with geometrical optics method and calculating the reflectance on interface with wavy optics method, finally the photons output distributions were simulated by Mote Carlo method. And some parameters to affect the light intensity distribution were analyzed in the paper, such as refractive index, size and absorption coefficient, which is significant for researching the LED. It is a good method to simulate the statistical characteristic of photons in LED by Monte Carlo method. This electronic document defines the standard format of the Chinese academic conference proceedings published by the Scientific Research Publishing (SRP). The elements such as the paper title, author, affiliation, abstract, section title, main text, figure, table and references are defined, and this document is formatted according to the SRP standard, which illustrates all the formats.

Keywords: Mote Carlo method, light-emitting diode, tracing, simulation

发光二极管的蒙特卡罗模拟

高铁成¹, 艾艳锦²

¹天津工业大学信息与通信工程学院, 半导体照明工程研发中心(大功率半导体照明应用系统教育部工程研究中心, 天津市半导体照明技术工程中心). 天津, 中国. 300160

²天津职业大学电子信息工程学院. 天津, 中国. 300410

Email: gaotiecheng@tjpu.edu.cn

摘要: 随着 LED 的应用, 对于 LED 一些技术问题上的改进成为当今的热点问题, 本文基于蒙特卡罗方法模拟了发光二极管的光强分布。利用几何光学方法追踪光子在芯片内部的传播, 同时运用波动光学方法计算出在界面处的反射系数, 结合蒙特卡罗方法利用 Matlab 软件模拟光子在 LED 中的飞行轨迹, 模拟出了各模型的光强分布, 并分析了材料的折射率、几何尺寸、吸收系数等参数对光强分布的影响, 对于 LED 的分析研究具有重要意义。

关键词: 蒙特卡罗, 发光二极管, 追踪, 模拟

1 引言

发光二极管(LED)以其亮度高、功耗低、寿命长、可靠性高、环保等优势将成为最佳的发光源之一^[1]。随着 LED 照明光源的应用, 如何提高 LED 的发光效率, 以及尽量将光线集中到有用的区域, 使其满足一定的光强分布成为大家关心的问题。要解决这些问题就必须对 LED 的光强分布做一定的分析研究^[2]。

以往的研究中都是采用几何光学的方法对所提出的结构进行模拟仿真和优化, 这种方法对单根光线的行进方向可准确控制而对整体的光强分布则难以表现, 因此对大面积芯

片和小封装结构显得不够精确和难以优化。本文在总结前人所做工作的基础上采用蒙特卡罗随机方法^[3]进行模拟, 分析 LED 的光强分布。

2 理论分析

LED 的结构如图 1 所示。基于自发辐射原理, 光子在有源区产生后将在芯片内部飞行, 如果不被吸收, 当光子碰撞到芯片边界时, 根据菲涅耳定律产生如图 2 所示的入射、折射及反射关系。

根据平面电磁波理论, 光的 TE 波和 TM 波的反射系数分别为:

$$R_{TE} = \left(\frac{n_s \cos \theta_i - n_e \cos \theta_t}{n_s \cos \theta_i + n_e \cos \theta_t} \right)^2 \quad (1)$$

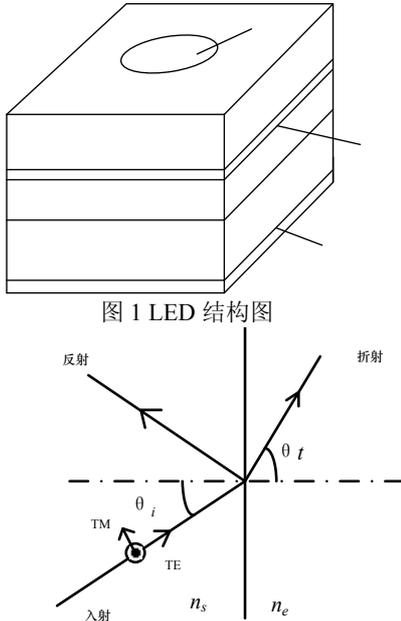


图1 LED 结构图

图2 光子在半导体分界面处的反射和折射

$$R_{TE} = \left(\frac{n_s \cos \theta_i - n_e \cos \theta_t}{n_s \cos \theta_i + n_e \cos \theta_t} \right)^2$$

光的 TE 波和 TM 波的透射系数分别为：

$$T_{TE} = \left(\frac{2n_s \cos \theta_i}{n_s \cos \theta_i + n_e \cos \theta_t} \right)^2 \quad (3)$$

$$T_{TM} = \left(\frac{2n_s \cos \theta_i}{n_e \cos \theta_i + n_s \cos \theta_t} \right)^2 \quad (4)$$

其中 n_s 、 n_e 为 LED 中两种不同材料的折射率， θ_i 、 θ_t 为光子的入射角和折射角。同时，反射和折射系数满足：

$$T_{TE} = 1 - R_{TE}$$

$$T_{TM} = 1 - R_{TM}$$

根据菲涅耳定律，入射角和折射角满足：

$$n_s \sin \theta_i = n_e \sin \theta_t$$

在绝大多数 LED 中， n_s 通常大于 n_e ，在这种情况下，存在一个全反射角 $\theta_c = \sin^{-1}(n_e/n_s)$ ，如果 $\theta_i > \theta_c$ ，将发生全反射。

不论对于 TM 波或 TE 波都有 $R+T=1$ 。在 LED 中，光子的极化是随机的，总的反射系数 R 可由 TM 和 TE 极化的线性关系表示^[4]：

$$R = (1 - \delta_{TM}^2)R_{TE} + \delta_{TM}^2 R_{TM} \quad (5)$$

其中 δ_{TM}^2 为 TM 极化系数，本文取 $\delta_{TM}^2 = 1/2$ 。

图 3 是以入射角 θ_i 为自变量，取折射率 $n_s=3.4$ ， $n_e=1.5$ ，由式 (1) — (5) 得出的反射系数和折射系数曲线图。图中分别标出了 TM 波和 TE 波的反射和折射系数，实线为取 $\delta_{TM}^2 = 1/2$ 时两者的叠加。由图中可以看出，该曲线类似于一个窗口函数，更形象地揭示了光子的折射和反射为入射角的函数，在入射角 θ_i 大于全反射角 θ_c 的情况下产生全反射。

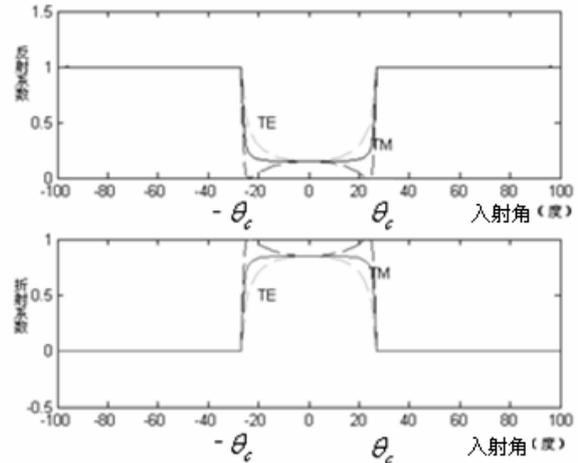


图3 反射、折射系数曲线

上层限制层
下层限制层

LED 中有源区内某一点产生的光子的飞行情况如图 4 所示。当光子的入射角（发射角）大于 θ_c 时，光子将发生全反射，限定在芯片内部飞行，如图虚线所示，直到与芯片界面的入射角小于 θ_c ，才有可能透射出芯片，否则视为光子被吸收。当光子的发射角小于 θ_c （如图所示 $2\theta_c$ 范围内）时，光子的反射透射是随机的，需要根据具体的反射系数判断。

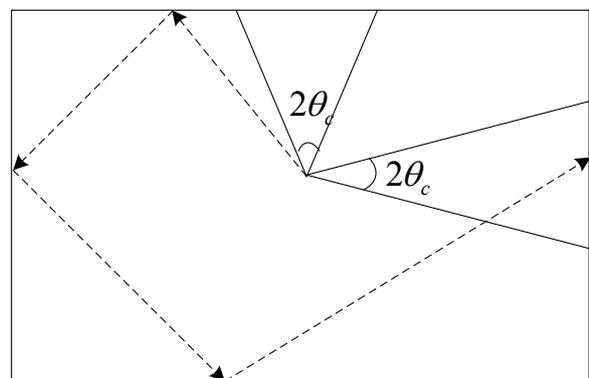


图4 光子在矩形芯片内部飞行

3 蒙特卡罗模拟

基于自发辐射的原理，可以认为 LED 在有源区内某处产生的光子在 2π 立体角内均匀分布。蒙特卡罗模拟所依据

的思想为：采用随机数发生器产生与芯片的光分布相似的随机数分布，本文采用均匀随机数，每个随机数对应于在有源区发射的一个光子。在有源区中心区域随机产生许多个 2π 立体角内均匀分布的光子，通过追踪光子的运动轨迹和决定光子的生存状态，统计最终出射到芯片外面的光子数。为简化模型，将发光区域等效为有源区的中心点，并且只考虑光子被材料吸收、在不同折射率界面上被反射或者透射^[5]。

3.1 在有源区随机产生一个光子

在有源区中心位置随机产生一个 2π 立体角内的发射角，该发射角决定光子的出射方向。光子的飞行轨迹由光子的发射位置和出射方向决定。光子产生后，在芯片内部自由飞行，直到与芯片边界发生碰撞。

3.2 判断光子是否被材料吸收

当光子与芯片边界发生碰撞时，根据发射位置 r_0 和出射方向确定与边界的碰撞位置 r_1 ，得到光子的飞行距离 l 和被材料吸收的概率 A ：

$$l = |\vec{r}_1 - \vec{r}_0| \quad (6)$$

$$A = \exp(-\alpha l) \quad (7)$$

式中 α 为材料光吸收系数。视光子被吸收是随机的，由程序产生一个 0 到 1 之间均匀分布的随机数 rdA ，判断 rdA 与计算出的被吸收的概率 A 的大小，若 $rdA > A$ ，光子被材料吸收，重复步骤 3.1，否则进入步骤 3.3。

3.3 判断光子在不同折射率界面上的折射或反射

当光子碰撞到不同折射率界面上时，根据不同材料的折射率和光子的入射角、折射角由式 (5) 计算出光子的反射系数 R ，然后通过程序产生一个 0 到 1 之间均匀分布的随机数 rdR ，将 rdR 与反射系数 R 比较，如果 $rdR > R$ ，光子透射到芯片的其他层中进行下一次的飞行，重复步骤 3.2；或者透射到芯片外部，进入步骤 3.4；否则，光子被反射，将会在光子所在芯片的原来层面内部进行下一次的飞行，重复步骤 3.2。可以设定光子在某一层中的最大反射次数 m ，当光子在某一层材料中的反射次数达到 m 仍透射不出去时，视为光子被该层材料吸收，重复步骤 3.1。

3.4 统计透射到 LED 芯片外部的光子数，记录出射角

根据光子透射到芯片外部的折射角，计算其相对应的外部空间角度，相对应的外部空间角度上的光子数加 1。

重复以上步骤，最后通过追踪随机产生的大量光子的飞行轨迹，统计 LED 各个方向上的出光强度，得到透射光的

强度分布。

4 模拟结果

根据模拟方法，我们建立了几种不同参数的模型，分别具有不同的尺寸、材料的吸收系数和材料的折射率。通过模拟得到了有源区水平截面内各个方向的光强分布和相对于有源区平面的竖直截面内各个方向的光强分布。各个模型及模拟结果如下。

图 5 为有源区水平截面内各个方向的透射光强度分布图，光强由透射到该方向的光子数表征。该模型

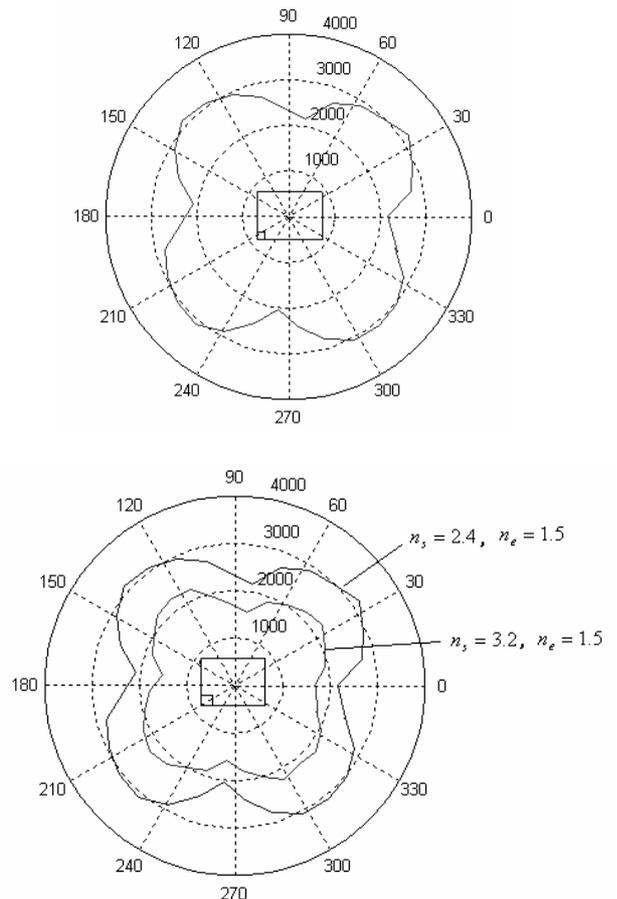


图 5 水平面内的透射光强度分布($n_s=2.4$, $n_e=1.5$) 图 7 不同折射率下透射光强度比较图

为有源区大小 $350\mu\text{m} \times 150\mu\text{m}$ ，有源区折射率 $n_s=2.4$ ，外部视为环氧树脂区，折射率为 1.5。在有源区中心位置产生 100000 个光子，设定最大反射次数为 10 次。从图中可以看出，水平截面内矩形的四个顶角方向上透射光强度比较大。图 7 为不同折射率下有源区水平截面内各个方向的透射光强度比较图。图中两条曲线分别是有源区折射率 $n_s=2.4$ ，外部折射率 n_e

=1.5 和 $n_s=3.2$, $n_e=1.5$ 两种情况下透射光强度分布曲线。该模型为在有源区中心位置随机发射 100000 个光子，透射光的强度是以透射出的光子数表征的。从图中可以看出，内外材料的折射率比值越小，透射光强度越大。

图 6 为有源区不同尺寸下透射光强比较图。图中两条曲线分别为水平截面内有源区为方形和矩形两种情况下的透射光强分布图。该模型为在有源区中心位置随机发射 100000 个光子，有源区折射率 $n_s=2.4$ ，外部折射率为 $n_e=1.5$ 。透射光强度以透射出的光子数表征。从图中可以看出，水平截面内有源区为方形时，透射光强度分布更均匀一些。图 9 为考虑吸收系数和不考虑吸收系数时有源区水平截面内各个方向的透射光强度比较图。如图所示两条曲线分别是考虑吸收系数和不考虑吸收系数时两种情况下透射光强度分布曲线，其中吸收系数为 $\alpha=200/cm$ 。从图中可以看出，考虑吸收系数时比不考虑吸收系数时的透射光强度弱，即光子被吸收的概率比较大。

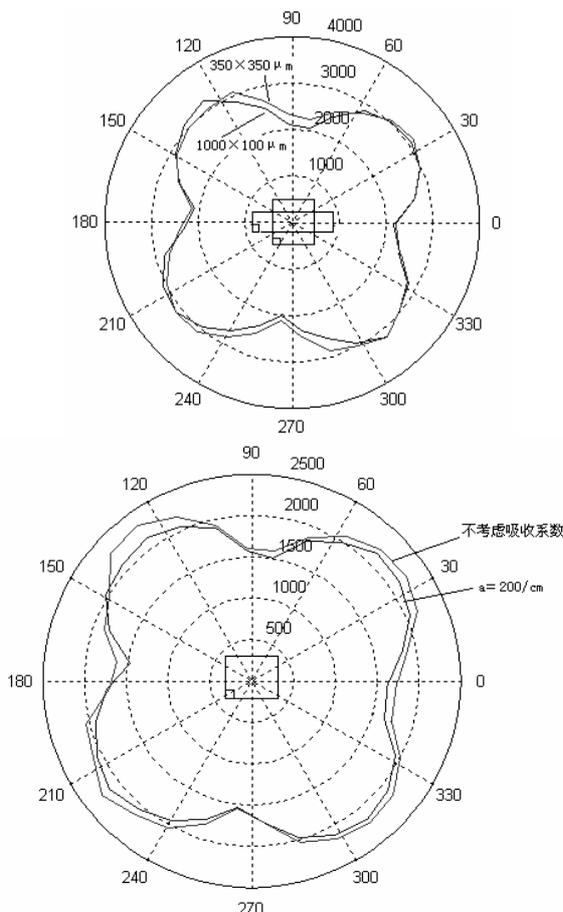


图 6 有源区不同尺寸下透射光强比较图
图 9 考虑不考虑吸收系数时的透射光强度比较图

对光子在 LED 芯片相对于有源区水平面的竖直截面内飞行情况的模拟所选取的模型中 LED 结构和计算所采用的参数见表 1。芯片外部视为环氧树脂，折射率 $n=1.5$ 。

表 1 LED 结构和材料的计算参数

材料	厚度 d (μm)	折射率 n	吸收系数 α (cm^{-1})
有源区	2	3.6	200
上限制层	20	3.4	8
下限制层	20	3.4	8
衬底	70	3.6	8000

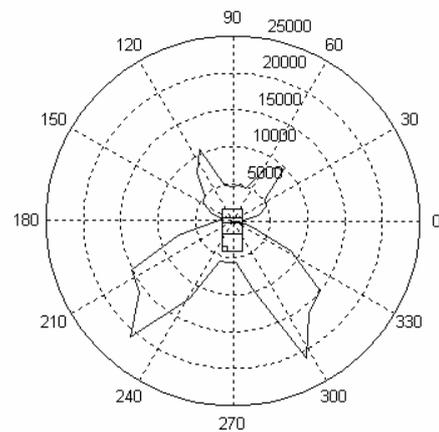


图 7 竖直截面内光强分布图

图 7 为 LED 在竖直截面内各个方向的光强分布。该光强分布曲线为在模拟模型下，在有源区底部中心位置随机产生 100000 个光子，在竖直截面内各个方向上统计的透射光子数，以透射的光子数表征透射光强度。

结论

建立了一种利用蒙特卡罗方法对发光二极管光子模拟的模型。利用蒙特卡罗方法，分析了影响 LED 光强分布的各个参数。结果表明，矩形有源区的四个顶角方向上透射光强度比较大；内外材料的折射率比值越小，透射光强度越大；水平截面内有源区为方形时，透射光强度分布更均匀一些；考虑吸收系数时比不考虑吸收系数时的透射光强度弱，即光子被吸收的概率比较大。

References (参考文献)

[1] Zhao Qingquan; Xia Xiaoling. The application and outlook of LED[J]. DAZHONG KEJI, 2005, (6):30-31

- 赵清泉,夏晓玲.半导体发光二极管的应用及前景[J].大众科技,2005,(6):30-31.
- [2] YAN Jun; YU Ying. LED s Optical Encapsulation Structure Design Based on Monte Carlo Simulation Method[J],*Chinese Journal of Luminescence*,2004, 25(1):90-93.
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].发光学报,2004, 25(1):90-93.
- [3] Fei Lucheng;Zhang Xiaoze; The Application of Monte Carlo Method in particles transsmition.Science Press.Beijing.1980.
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.科学出版社,北京:1980
- [4] Lee S J. Analysis of light-emitting diodes by Monte Carlo photon simulation [J]. *Appl. Opt.*, 2001, 40(9):1430-1434.
- [5] SHENTU Wei-jin,Hu Fei,HAN Yan-jun,Xue Song. Study on Light Extraction Efficiency of GaN-based Light-emitting Diode Chips[J].*Journal of Optoelectronics.laser.* 2005.16(4):385-389.
申屠伟进,胡飞,韩彦军等.GaN 基发光二极管芯片光提取效率的研究[J]. 光电子·激光, 2005, 16(4):385-389.