

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

子計畫二-以奈米壓印設計製作具光子晶體之高效能暨高指向性的發光二極體

Preparation of NSC Project Reports

計畫編號：NSC 97-2221-E-009-057-MY3

執行期限：97 年 08 月 01 日至 100 年 07 月 31 日

主持人：趙昌博 國立交通大學 電機與控制工程學系

中文摘要

本計畫目標在於經由完美的光子晶體 (PCs) 結構，使得有機多分子發光二極體 (PLED) 達到高指向性和高取光效率。本計畫第一年度利用基因演算法將光子晶體的排列方式作最佳化來找出最佳的周期、厚度以及填充係數。並成功透過聚焦離子束 (FIB) 製程技術，在有機多分子發光二極體上製作大面積亦可重複之的光子晶體。這項技術對於商品化是可行的，甚至可應用在主動式矩陣 PLED 顯示器。

關鍵詞：取光效率、光子晶體、聚焦離子束

Abstract

The objective of this study is to achieve high directionality and extraction of light emission from polymer light-emitting diodes via optimizing photonic crystals (PCs). Genetic Algorithm is employed to search the optimal PC period, depth and filling factor. The large-area PCs are fabricated by Focus Ion Beams for PLED, which is commercially viable, even applicable to active matrix PLED displays.

Keywords: Light Extraction Efficiency, Photonic Crystal, Directional Emission Control

一、計畫執行內容

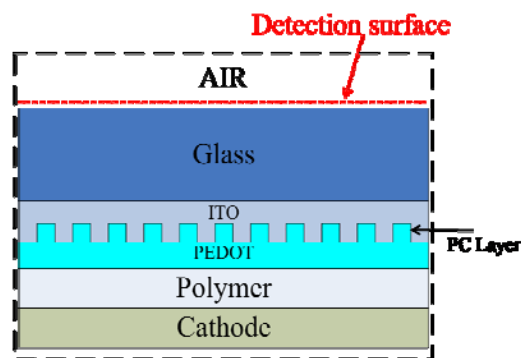
1.1 有機多分子發光二極體

發光二極體的光源輸出損失可以分為兩種：一種是全反射損失、另一種是 Fresnel 損失。Fresnel 損失是當光源由折射率為 n_1 的物質射入折射率為 n_2 的物

質，有一部分的光源會被反射回去，而在兩種不同物質中的反射係數 R 如方程式 (1)。

$$R = \left(\frac{n_2 - n_1}{n_2 + n_1} \right)^2 \quad (1)$$

在目前，大部分提升發光二極體的取光效率，其效果是很有限的。因此，為了再提高發光二極體的取光效率，有越來越多的研究，把光子晶體製作在發光二極體上。本計畫為了提高 PLED 的指向性和取光效率，我們將光子晶體結構設計在 PLED 的銦錫氧化物層 (ITO)，如圖一所示。



圖一、PC-LED 結構概要圖

而 PLED 的外部量子效率 η_{ex} ，跟其內部量子效率 η_{in} 及取光效率 η_{ext} 息息相關。關係式如方程式 (2) 所示：

$$\eta_{ex} = \eta_{in} \times \eta_{ext} \quad (2)$$

1.2 光子晶體

1987 年，兩位科學家 Eli Yablonovitch 教授與 Sajeev John 教授，在理論上發現

週期性的介電質中，電磁波的傳播模態具有能帶結構。把這種折射率在空間上具有週期性變化的物質，稱為光子晶體。由於光屬於電磁波的一種，因此要探討光子晶體的特性與能帶圖則必須從馬克斯威爾方程式(Maxwell's equations) 開始推導[1]：

$$\begin{cases} \nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t} \\ \nabla \times H = -\frac{\partial D}{\partial t} + J \\ \nabla \cdot D = \rho \\ \nabla \cdot B = 0 \end{cases} \quad (3)$$

其中 E、H、D、B 分別是電場、磁場、電位移、磁感應，而 J 和 ρ 分別是電流密度和電荷密度。在此不討論波源的問題，忽略 J、 ρ 這兩項。假設馬克斯威爾方程式是線性的，因此我們能將空間 r 和時間 t 上的電場和磁場展開成時諧場(time-harmonic fields)。如方程式(4)所示：

$$\begin{cases} E(r,t) = E(r)e^{j\omega t} \\ H(r,t) = H(r)e^{j\omega t} \end{cases} \quad (4)$$

其中 ω 為電磁波的角頻率。在此只討論非均勻介質中的介電常數(dielectric constant, ϵ) 為隨位置而週期性變化的函數 $\epsilon(r)$ ，而磁導率(permeability, m) 為真空中的磁導率 μ_0 。

$$\begin{cases} D = \epsilon(r)E \\ \epsilon(r+R) = \epsilon(r) \end{cases} \quad (5)$$

$$B = \mu_0 H \quad (6)$$

其中 $R = m_1a_1 + m_2a_2 + m_3a_3$ 為晶格向量(lattice vector)，而 a_i 為其基底。 $G = l_1b_1 + l_2b_2 + l_3b_3$ 為倒晶格向量(reciprocal lattice vector)，而 b_j 為其基底。兩向量間的關係為 $a \cdot b = 2\pi\delta_{ij}$ 。將方程式(4)-(6)代入(3)式，可得赫姆霍茲方程式(Helmholtz equations) 如下：

$$\begin{cases} \frac{1}{\epsilon_r(r)} \nabla \times [\nabla \times E(r)] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 E(r) \\ \nabla \times \left[\frac{1}{\epsilon_r(r)} \nabla \times H(r) \right] = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 H(r) \end{cases} \quad (7)$$

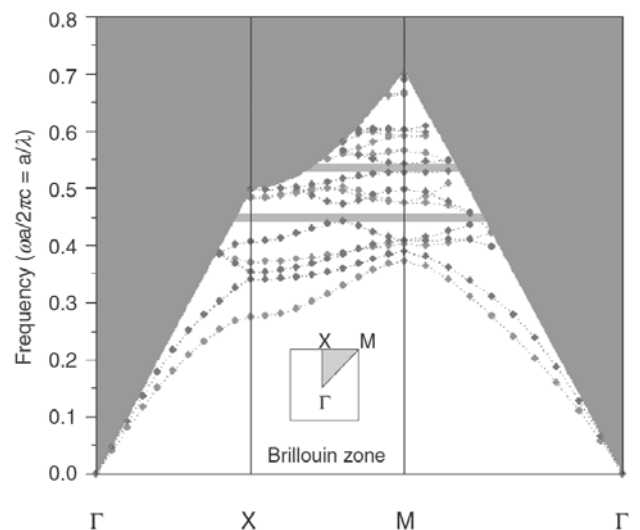
在方程式(7)，c 為真空中的光速，而 $\epsilon_r(r)$ 為相對介電常數在空間上變化的函數。透過給定的 $\epsilon_r(r)$ ，我們可以利用平面波展開法(plane-wave expansion method)，將 $\epsilon_r(r)$ 和 H(r) 展開成傅立葉級數(Fourier series)，如下所示：

$$\begin{cases} \frac{1}{\epsilon_r(r)} = \sum_G \kappa(G) \exp(iG \cdot r) \\ H(r) = \sum_G H_{nk}(r) \exp(iG \cdot r) \exp(ik \cdot r) \end{cases} \quad (8)$$

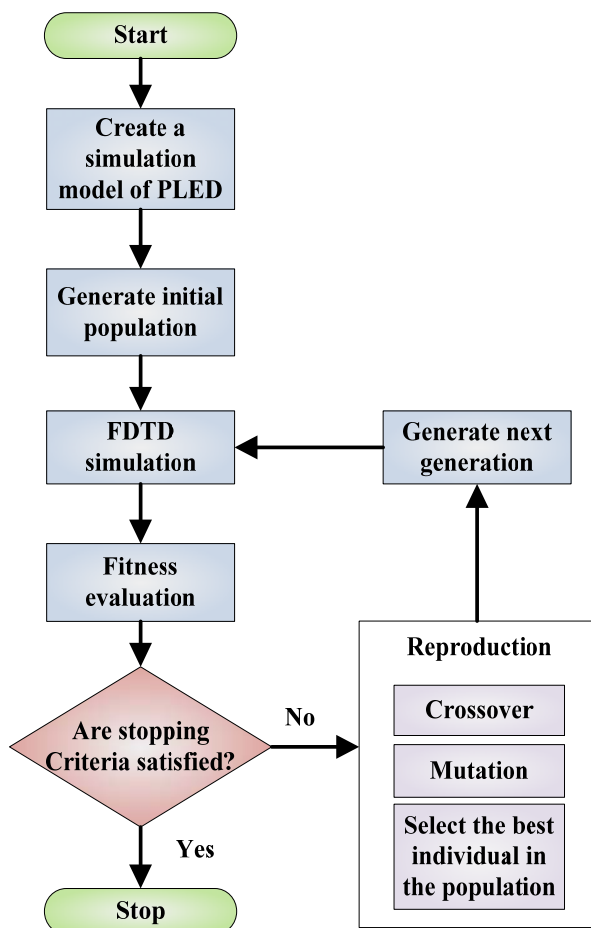
將(8)式代入(7)式後，我們便能夠解出在不同頻率 ω 下所對應的磁場 H(r)，並可藉由求得的解來畫出光子晶體的能帶圖，如圖二。

1.3 光子晶體最佳化設計

在設計光子晶體中，我們使用基因演算法[2-4]搭配有限時域差分法[5-6]來做最佳化，其方法流程如圖三所示。基因演算法是模仿自然界物競天擇、適者生存的方法，利用染色體、適應能力、基因交換及

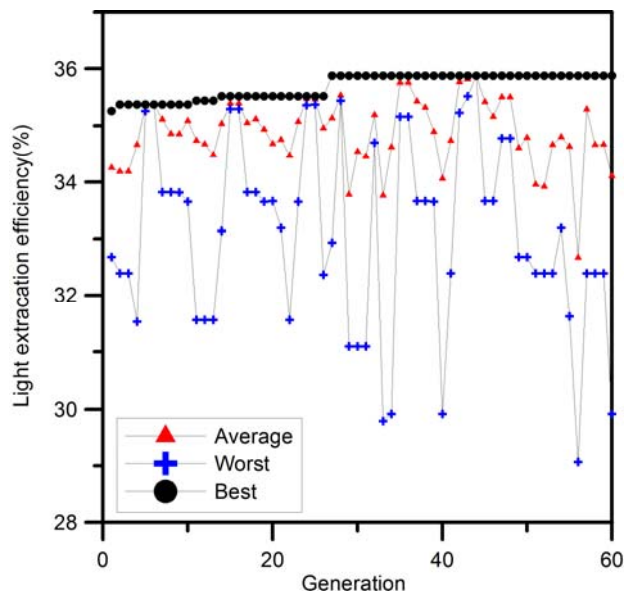


圖二、正方晶格結構的光子晶體能帶圖



圖三、基因演算法流程圖

基因突變等規則性之自然演算過程來取得最佳解。首先隨機產生一個由個體集合所構成之初始群組，這個個體集合是從取光效率(LEE)曲線中挑選出來。我們把 LEE 曲線標示為 $E(\lambda)$ ，並利用染色體集合 $\{\lambda, r\}$ 來做配對。其中將 λ 定義為光子晶體中心與中心的距離， r 定義為光子晶體結構的半徑。而每個個體的適應性是直接跟誤差函數 J 相關，若要找出最佳解，這個誤差函數 J 必須是最小的。所有基因演算法最佳過程之適應函數如圖四所示。有限時域差分法主要是在一個有限體積之計算空中，利用二階中央差分法離散化的馬克斯威爾旋度方程式，再加上網格的配置，在時域上模擬模擬電磁波在空間之傳播 [7-9]。使用有限時域差分法數值模擬搭配基因演算法的主要就是在有限的電腦資源下達到最好的模擬效能。而這裡我們使用一台型號為 IBM System x3850 M2，中央處理器是兩個 Intel Xeon MP 7330 QC 2.40 GHz、記憶體為 32GB ECC DDR2

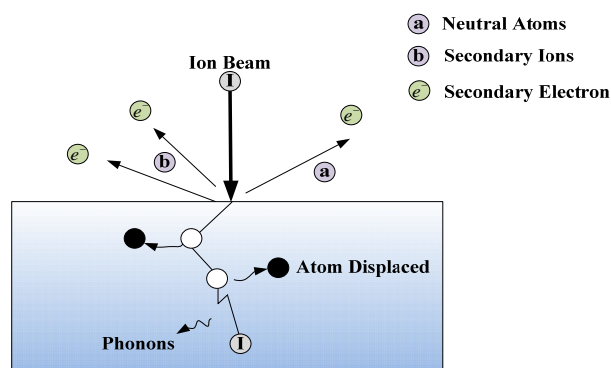


圖四、適應性函數計算過程

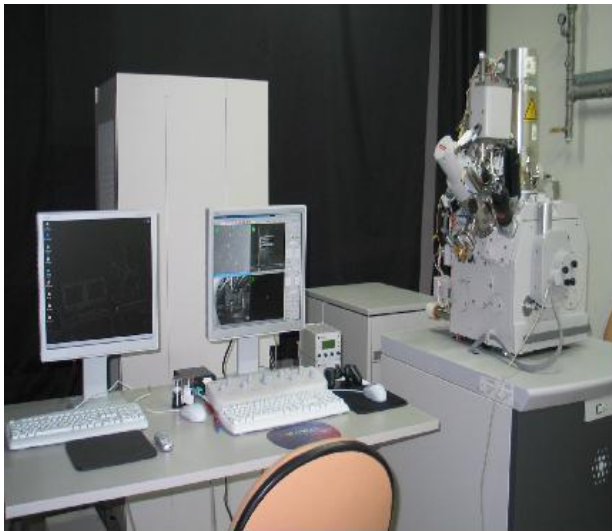
SDRAM 的超級運算平行電腦上做平行運算及驗證實驗結果。

1.4 光子晶體結構製作

對於製作具有光子晶體結構之聚合物發光二極體(PC-PLED)，我們使用聚焦離子束(FIB)的方法來蝕刻出最佳的光子晶體樣式。FIB 是英文 Focused Ion Beam 的縮寫，簡單的說就是將 Ga(鎵)元素離子化成 Ga^+ ，然後利用電場加速。再利用靜電透鏡(electrostatic)聚焦，將高能量(高速)的 Ga^+ 打到指定的點。經過高電壓加速後的離子快速撞擊物質表面，可分為彈性碰撞與非彈性碰撞。彈性碰撞會造成原子移位和表面濺擊，非彈性碰撞會產生二次電子、X 光以及光子散射，如下圖五所示。FIB 技術特點在於利用 Ga 離子的物理碰撞直接在樣品上蝕刻，不需要透過光罩進行圖案轉移。所用到之機台為交通大學奈

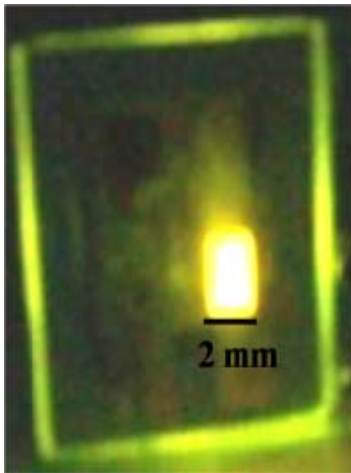


圖五、離子轟擊反應圖



圖六、FIB 設備

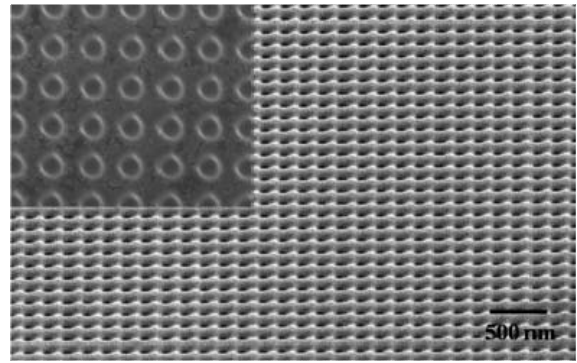
米中心裡型號 FEI Nova 200 的聚焦離子束與電子束顯微鏡，如圖六所示。圖七為 FIB 實驗做出來之 PC-PLED，從掃描式電子顯微鏡(SEM)，我們可以清楚看到藉由 FIB 在 PLED 上蝕刻出方形晶格光子晶體的樣式，如圖八。將無具有光子晶體結構之 PLED(non-PC PLED)與 PC-PLED 做比較，並利用時域有限差分法來計算模擬遠場亮度分布圖，如圖九所示。我們可以發現 PC-PLED 之取光效率比 non-PC PLED 超出 46%。



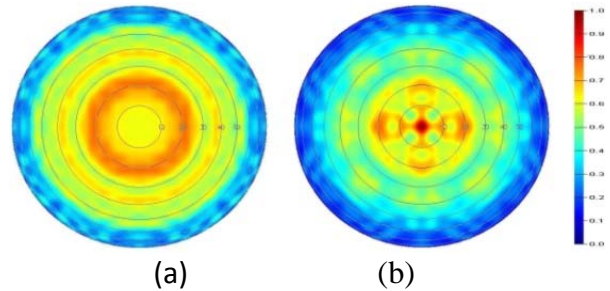
圖七、PC-PLED

二、結論

我們利用有限時域差分法與基因演算法的方法來進行光學模擬，並做光子晶體尺寸與結構的最佳化及驗證實驗結果的準確性。再根據 FIB 實驗結果建構出 PC-PLED，而其取光效率及指向性都比



圖八、光子晶體之 SEM 圖



圖九、遠場亮度分布圖(a)non-PCPLED
(b)PC-PLED

non-PC PLED 好。對於在 PLED 上製作大面積的光子晶體，增加取光效率及指向性是影響製作成功的關鍵。

三、成果自評

將光子晶體之電磁波公式經過推導，並利用有限時域差分法搭配基因演算法找出最佳化的光子晶體尺寸以及結構，最後透過 FIB 實驗製作出大面積之光子晶體。在之後的計畫中，將利用 FIB 與 E-beam 來製作大面積之模具、重覆性高，又有相當高的產出效率之奈米壓印技術實現 PC-PLED。

四、參考文獻

- [1] 陳健中、蘇炎坤，“光子晶體發光二極體”，科儀新知第二十八卷第二期(2006)
- [2] D. Correia, V. F. Rodriguez-Esquerre, and H. E. Hernandez-Figueroa, “Genetic -algorithm and finite element approach to the synthesis of dispersion-flattened fiber,” *Microw. Opt. Techn. Lett.*, 31, 245 (2001).
- [3] S. R. Tseng, H. F. Meng, C. H. Ye, H. C. Lai, S. F. Horng, H. H. Liao, C.S. Hu, L. C. Lin, “High-efficiency Blue

- Multilayer Polymer Light-emitting Diode Fabricated By a General Liquid Buffer Method”, *Synthetic Metal* 158, 130 (2008).
- [4] H. Wei, Z. Tong, and S. Jian, “Use of a genetic algorithm to optimize multistage erbium-doped fiber amplifier systems with complex structures,” *Opt. Express* 12, 531 (2004).
- [5] A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: the finite-difference time-domain method*, Artech House, Norwood, MA, 2nd ed., (2000).
- [6] S. Noda, “Full three-dimensional photonic band-gap crystals at near infrared wavelengths,” *Science*, vol. 289, pp. 604–606, Jul., (2000).
- [7] 湯家榮, “時域有限差分法在光子晶體特性分析之應用”, 國立台灣大學應用力學研究所碩士論文。(2002)
- [8] 楊富超, “以時域有限差分法分析光子晶體光纖”, 國立中山大學通訊工程研究所碩士論文。(2006)
- [9] 許委斌, “時域有限差分方程之研究及其在光子晶體之應用”, 大同大學光電工程研究所碩士論文。(2002)

可供推廣之研發成果資料表

可申請專利

可技術移轉

日期：__年__月__日

<p>國科會補助計畫</p>	<p>計畫名稱：以奈米壓印設計製作具光子晶體之高效能暨高指向性的發光二極體</p> <p>計畫主持人：趙昌博</p> <p>計畫編號：NSC 97-2221-E-009-057-MY3 學門領域：</p>
<p>技術/創作名稱</p>	
<p>發明人/創作人</p>	
<p>技術說明</p>	<p>中文：</p> <p style="text-align: center;">(100~500 字)</p>
	<p>英文：</p>
<p>可利用之產業 及 可開發之產品</p>	
<p>技術特點</p>	

推廣及運用的價值	
----------	--

- ※ 1. 每項研發成果請填寫一式二份，一份隨成果報告送繳本會，一份送 貴單位研發成果推廣單位（如技術移轉中心）。
- ※ 2. 本項研發成果若尚未申請專利，請勿揭露可申請專利之主要內容。
- 3. 本表若不敷使用，請自行影印使用。