

國立交通大學

電子工程學系電子研究所碩士班

碩士論文

利用金屬孔洞電極提升發光二極體
之外部量子效率



**Enhancement of the external efficiency of
light-emitting diodes
by using metallic hole array contacts**

研究生：廖宏韋

指導教授：顏順通 教授

中華民國九十九年八月

利用金屬孔洞電極提升發光二極體
之外部量子效率

**Enhancement of the external efficiency of
light-emitting diodes
by using metallic hole array contacts**

研究生：廖宏韋

Student : Hung-Wei Liao

指導教授：顏順通 博士

Advisor : Dr. Shun-Tung Yen



A Thesis

Submitted to Department of Electronics Engineering & Institute of Electronics

College of Electrical and Computer Engineering

National Chiao Tung University

In Partial Fulfillment of the Requirements

For the Degree of Master

In

Electronics Engineering

August 2010

中華民國九十九年八月

利用金屬孔洞電極提升發光二極體 之外部量子效率

學生：廖宏韋

指導教授：顏順通 博士

國立交通大學

電子工程學系電子研究所碩士班



本論文提出自洽計算及傅立葉模型法探討金屬孔洞電極發光二極體之電性與光性。考慮光子循環效應下，以蒙地卡羅光跡追蹤法計算載子產生速率並加於電子電洞連續方程式中。入射光激發電極表面態使得大於臨界角仍有穿透率以及利用週期性結構造成布拉格散射，改變光子反射路徑來降低全反射效應。金屬孔洞電極不僅可以提升光萃取效率同時也可以解決電流擴散及散熱問題。此外我們也分析金屬孔洞長度、電極厚度的影響，在適當的電極設計下其外部量子效率與傳統平面式結構相比有顯著提升但仍低於表面粗化結構。

Enhancement of the external efficiency of light-emitting diodes by using metallic hole array contacts

Student : Hung-Wei Liao

Advisor : Dr. Shun-Tung Yen

Department of Electronics Engineering & Institute of Electronics

National Chiao Tung University



In this thesis, we present a self-consistent calculation and Fourier Modal Method to investigate the electrical and optical properties of light-emitting diodes with metallic hole array contacts. For the photon recycling effect, we include a generate rate in the electron-hole continuity equations which is obtained by the Monte-Carlo ray-tracing method. The limitation of the critical angle can be broken by surface-state assisted transmission. In addition, the light with large incident angles has the opportunity to be scattered into the light cone. Thus, the extraction efficiency can be improved. In addition, we studied the influences of the hole size as well as the contact thickness on the device performance. With a proper design we find that the external efficiency can be significantly improved which is larger than that for planar surface structures but lower than that for surface texture structures.

致謝

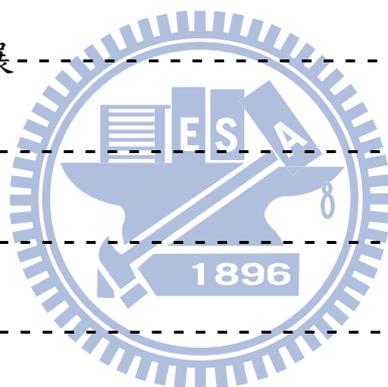
碩士兩年生涯終究是熬過了，回想起剛從大學畢業抱著忐忑不安的心情進到實驗室，如今卻要帶著滿滿的不捨離開交大校園。在這段求學旅途中我最感謝的是我的指導教授 顏順通 博士，從老師身上學習到身為學者的風範，除了學識上的陶冶、做人處事的道理之外，最重要的是懂得誠實與為自己負責。老師在學術上的堅持與執著也讓我十分敬佩與充滿敬意。

接著我要感謝實驗室的各位，一路走來最感謝的就是冠成學長，學長總是不厭其煩的替我解決研究上的問題，英明的領導使我能快速的熟悉研究領域避免走冤枉路。感謝佩鋼學長、德賢學長平日的指導與教誨，感謝泓文同學在我研究上提供的實質協助以及皓宇、晉勛、仲村、宗謀同學平日的陪伴與相處，使我碩士生活充滿回憶。最後還要感謝黃遠東教授實驗室的博班學長，無償提供我超級電腦跑 Data。

我要感謝我的父母，提供給我這麼好的環境，能夠無憂無慮的求學問，不斷的鼓勵我，使我能朝自己的興趣去發展，在他們身上我看到了對子女的無悔付出。最後，我要感謝從大學陪伴我到現在的女友 riva，在我最忙碌的時候，妳能包容我；在我失落挫折時，妳能鼓勵我，給我站起來的力量。在此萬分的感謝大家，我愛你們。

目錄

摘要	i
Abstract	ii
致謝	iii
目錄	iv
圖目錄	vi
表目錄	viii
第一章 簡介	-1
1-1 發光二極體之發展	1
1-2 研究動機與目的	7
1-3 模擬結構	10
1-4 發光效率	13
第二章 理論	-16
2-1 光性	-16
2-1-1 傳統平面式發光二極體	-16
2-1-2 表面粗化發光二極體	17
2-1-3 金屬孔洞電極發光二極體	21
2-2 電性	-24
2-2-1 基本方程式	24
2-2-1-1 漂移擴散電流	-26



2-2-1-2 熱激發電流-----	27
2-2-2 數值方法-----	29
2-2-2-1 Newton-Jacobin Iteration Method-----	32
2-2-2-2 Newton-Raphson Method-----	34
2-3 蒙地卡羅光跡追蹤法-----	38
2-4 光性、電性與蒙地卡羅的結合-----	40
第三章 結果與討論-----	42
3-1 模擬假設與參數-----	42
3-2 金屬孔洞電極提升外部量子效率的機制-----	45
3-4 主動層摻雜-----	47
3-4 主動層厚度分析-----	48
3-5 金屬孔洞內填充SiO ₂ 的影響-----	50
3-6 週期與孔洞長度 A/a 分析-----	51
3-7 金屬孔洞電極厚度分析-----	55
3-8 金屬孔洞電極週期長度分析-----	57
3-9 最佳化表面粗化結構-----	59
第四章 結論-----	61
參考文獻-----	63
簡歷-----	65



圖目錄

圖 1.1	發光二極體各發展階段之元件結構(I)。	4
圖 1.2	發光二極體各發展階段之元件結構(II)。	6
圖 1.3	發光二極體發展年表及其發光強度。	6
圖 1.4	薄膜金屬孔洞電極發光二極體元件結構。	10
圖 1.5	薄膜金屬孔洞電極發光二極體製程步驟。	12
圖 1.6	外部量子效率計算圖像。	15
圖 2.1	傳統平面式發光二極體。區域一是空氣層；區域二是直徑 $100\mu\text{m}$ 的金(Au)電極；區域三是長寬各 $300\mu\text{m}$ 的 n -type GaAs 接觸層。	17
圖 2.2	表面粗化發光二極體。區域一是空氣層；區域二是直徑 $100\mu\text{m}$ 的金(Au)電極；區域三是長寬各 $300\mu\text{m}$ 的 n -type GaAs 接觸層。 n -type GaAs 接觸層與空氣層之間具有粗糙界面。	19
圖 2.3	表面粗化發光二極體示意圖。在 $\phi=\text{constant}$ 下界面粗糙度由 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 表示，其中 θ_n 是粗糙界面法向量 $\hat{\mathbf{n}}_{\text{texture}}$ 與平面法向量 $\hat{\mathbf{n}}_{\text{planar}}$ 的夾角。入射角相對於平面法向量為 θ_i ，相對於粗糙界面法向量為 $\theta_i - \theta_n$ 。	20
圖 2.4	平面法向量旋轉方向。先固定 ϕ 角轉動 θ_n 角，再固定 θ_n 角轉動 ϕ 角。在 $\phi=\text{constant}$ 下與入射方向同向轉 θ_n 定義為負，反之為正。在 $\theta_n=\text{constant}$ 下繞 $+z$ 軸逆時針轉 ϕ 定義為正，反之為負。	20
圖 2.5	$\cos^{n_{st}} \theta_n$ 表面粗糙度。 n_{st} 值越大(~ 5000)越接近於平面， n_{st} 值越小表面彎曲程度越大，入射光所看到的粗糙界面法向量範圍也越廣。	20
圖 2.6	金屬孔洞電極結構。區域一是空氣層；區域二是金屬孔洞電極；區域三是 n -type GaAs 接觸層。 A 是週期長度， a 是正方形孔洞邊長，金屬厚度為 h 。	21
圖 2.7	各區域基底展開係數。 \mathbf{A}_1 、 \mathbf{B}_1 是區域一的展開係數； \mathbf{A}_2 、 \mathbf{B}_2 是區域二的展開係數； \mathbf{A}_3 、 \mathbf{B}_3 是區域三的展開係數。各展開係數之間的關係由界面的水平電場、磁場連續條件決定。	23
圖 2.8	熱激發電流模型。電子由第一區流入第二區或第二區流入第一區，能量必須高於 $\Delta\phi_1$ 或 $\Delta\phi_2$ ，在界面處準費米能階 E_{Fc1} (interface)、 E_{Fc2} (interface) 不再連續會分裂開。	29
圖 2.9	材料內部切割點的方式。位能、傳導帶能量、價電帶能量、準費米能階定義在點上，電流定義在兩點之間。	30
圖 2.10	材料界面上切割點的方式。在界面上定義兩個間距非常小約 10^{-12}cm 的點，兩個很靠近的點之間的電流 J_n^i 為熱激發電流，而 J_n^{i-1} 、 J_n^{i+1} 為漂移擴散電流。兩點數值的差異(如 ΔE_c 、 ΔE_v 、 ΔE_{Fc} 、 ΔE_{Fv})可充份描述界面上不連續的情形。	30
圖 2.11	迭代法求解示意圖。	33
圖 2.12	Newton-Jacobin Iteration Method 流程圖。	34
圖 2.13	Newton-Raphson Method 以泰勒展開式求解 $f(x)=0$ 。	35
圖 2.14	蒙地卡羅光跡追蹤模擬流程圖。	40

- 圖 2-15 光性、電性與蒙地卡羅結合流程圖。 41
- 圖 3.1 金屬孔洞電極以不同波長入射所對應穿透率。在半高寬範圍內($3k_B T$)穿透率沒有明顯的變化。 42
- 圖 3.2 入射各種角度的光於金屬孔洞電極，布拉格散射導致不同模態折射角與反射角，加總為穿透率 T 與反射率 R ，其中金屬損耗 $L=1-(T+R)$ 。 45
- 圖 3.3 入射光在 $\phi=0^\circ$ 、不同 θ 角所對應的穿透率。(a)為 GaAs/空氣界面 (b)為金屬孔洞電極。可以發現(b)當入射角大於臨界角仍有微量穿透率。 46
- 圖 3.4 金屬孔洞電極之光子色散關係 $\omega-k_{||}$ 。 46
- 圖 3.5 金屬孔洞電極內部填充 SiO_2 、 $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 、 $h=0.1\mu\text{m}$ 、主動層厚度 100nm 條件下的模擬結果。(a)不同偏壓下的載子注入效率、內部量子效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。(b)不同偏壓下的輻射復合電流密度及非輻射復合電流密度。 49
- 圖 3.6 不同主動層厚度下的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。主動層厚度在 $1.5\mu\text{m}$ 有最大的外部量子效率。 49
- 圖 3.7 模擬結果。 $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 、 $h=0.1\mu\text{m}$ 的金屬孔洞電極填充與不填充 SiO_2 的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。填充 SiO_2 後外部量子效率由 14% 增加至 15.5%。 50
- 圖 3.8 表面態近場分佈。(a)孔洞填充 SiO_2 (b)孔洞沒有填充 SiO_2 。 51
- 圖 3.9 模擬三種不同平面式結構。(a)有直徑 $100\mu\text{m}$ 圓形電極 (b)沒有圓形電極 (c)GaAs 接觸層與空氣界面有 SiO_2 。 52
- 圖 3.10 模擬結果。不同孔洞長度 a 的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。元件設計不良如 $a\leq 0.31\mu\text{m}$ ($\text{EQE}=12.601\%$) 會使其外部量子效率比平面式結構($\text{EQE}=13.254\%$)低。 54
- 圖 3.11 表面態近場分佈。(a) $a=0.27$ (b) $a=0.29$ (c) $a=0.31$ (d) $a=0.33\mu\text{m}$ 。 54
- 圖 3.12(a) $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 、孔洞填充 SiO_2 ，改變不同金屬電極厚度的模擬結果。(b) 改變入射光 $\theta=0\sim 16^\circ$ ，觀察不同金屬孔洞電極厚度下的穿透率，垂直入射下在厚度 $h=0.22\mu\text{m}$ 、 $h=0.6\mu\text{m}$ 及 $h=0.98\mu\text{m}$ 發現有 Fabry-Perot 干涉現象。 55
- 圖 3.13 改變入射光 $\theta=0\sim 16^\circ$ ，觀察不同金屬孔洞長度 a 與不同電極厚度下的穿透率，發現第一階 Fabry-Perot 建設性干涉發生的厚度隨著孔洞長度縮小而增加。(a) $a=0.27$ (b) $a=0.29$ (c) $a=0.31$ (d) $a=0.33\mu\text{m}$ 。 57
- 圖 3.14 模擬結果。固定 $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 比值並將其長度等比例縮小及放大所得的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。 58
- 圖 3.15 入射角 $\theta_i=30^\circ$ ，不同粗糙界面法向量(θ_n)在不同表面粗糙度 n_{st} 值之機率分佈。 60
- 圖 3.16 表面粗化結構在不同表面粗糙度下之外部量子效率。 60

表目錄

表 2.1	Newton-Jacobin Iteration Method 與 Newton-Raphson Method 方法比較。	37
表 3.1	AlGaAs 及 GaAs 材料參數。	44
表 3.2	以各種角度入射填充 SiO ₂ 後的金屬孔洞電極，所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率。	50
表 3.3	以各種角度入射不同孔洞長度 a 的金屬孔洞電極所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率。	53
表 3.4	固定週期 $A = 0.35\mu\text{m}$ ，不同孔洞長度 a 所對應的外部量子效率。	53
表 3.5	固定 $A/a = 0.35/0.33\mu\text{m}$ 比值並將其長度等比例縮小及放大所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率。	58



第一章 簡介

1-1 發光二極體(Light-Emitting Diodes, LEDs)之發展

發光二極體之發展最早追溯到 1907 年美國 H. J. Round 提出 SiC LED [1]，將 SiC 晶體與金屬電極接觸形成蕭特基二極體(Schottky Diode)，但此二極體的材料特性很差。1969 年 SiC 製程技術的進步及 $p-n$ 接面的製作，美國奇異公司提出功率轉換效率 0.005% 的 SiC 藍光 LED [2]。爾後幾年 SiC 非直接能隙的特性使其效率無法提升，直到 1993 年 Edmond 才提出波長 470nm，功率轉換效率 0.03% 的 SiC 藍光 LED [3]。

1950 年以氣相磊晶(Vapor Phase Epitaxy, VPE)及液相磊晶(Liquid Phase Epitaxy, LPE)成長 GaAs 基板及 GaP、GaAsP 材料。1962 年美國奇異公司 Holonyak 和 Bevacqua 以氣相磊晶法將 GaAsP 成長於 GaAs 基板上，發表首顆在可見光波段 $p-n$ 接面的 GaAsP 紅光 LED [4]。然而 GaAsP 與 GaAs 基板晶格不匹配產生大量晶格缺陷以及磷含量過高形成非直接能隙材料使得發光效率無法提升，於是 1969 年 Nuese 以很厚的 GaAsP 緩衝層來降低與 GaAs 基板之間的晶格缺陷 [5]。GaAsP LED 低成本低亮度的特性目前主要作為指示燈泡用途。1963 年 Allen 等人在 p -GaP 摻雜錫(Sn)，發表第一顆 $p-n$ 接面 GaP LED [6]。由於 GaP 非直接能隙的特性，需藉由摻雜均電性雜質使電子動量偏

移來達到動量守恆。1968 年 AT&T 貝爾實驗室 Logan 等人在 GaP 中摻雜氮，提出 $\text{EQE}=0.6\%$ 的 GaP 綠光 LED [7]。

1980 年由於 AlGaAs 材料與 GaAs 基板晶格匹配具有高磊晶品質，開始用來製作高亮度 LED。1982 年日本東北大學 J. Nishizawa 等人提出單異質結構(Single Heterojunction, SH)AlGaAs 紅光 LED [8]，然而主動層 AlGaAs 能隙大於基板 GaAs 能隙，大量的光會被基板吸收，因此 1983 年日本松下公司 H. Ishiguro 提出雙異質結構(Double Heterojunctions, DH)及應用透明 AlGaAs 基板製作紅光 LED，其雙異質結構大幅增加載子注入效率，同時也解決了 GaAs 基板吸光問題 [9]。AlGaAs 材料雖然可以用來製作高亮度 LED，但是當 Al 比例大於 0.45 會變成間接能隙材料，因此 AlGaAs 材料只適用於紅光波段。

1990 年有機金屬化學氣相沉積(MOCVD)設備的出現，開啟了高亮度 AlGaInP LED 的製作。與 AlGaAs 相比 AlGaInP 具有寬廣的能隙，可應用於紅光(625nm)、橘光(610nm)及黃光(590nm)波段。1990 年美國 HP 公司 C. P. Kuo 等人最先提出封裝後 $\text{EQE}>2\%$ ，成長在 GaAs 基板上的 $p-n$ 接面 AlGaInP 黃光 LED [10]，同年日本 Toshiba 公司的 H. Sugawara 等人以 AlGaAs 窗戶層(Window Layer)製作 $\text{EQE}=1.5\%$ 的 AlGaInP 橘光 LED [11]，希望利用窗戶層增加側面出光及電流擴散均勻性。1992 年美國 HP 公司 K. H. Huang 等人提出 $\text{EQE}>6\%$ ，以 $15\ \mu\text{m}$

~45 μm 厚 GaP 當作窗戶層的 AlGaInP LED [12]，其概念與 AlGaAs 窗戶層類似但 GaP 擁有更大的能隙及透光率。為了解決 GaAs 基板吸光問題，1993 年日本 Toshiba 公司 H. Sugawara 等人提出 DBR 結構，該結構可以反射朝基板入射的光避免被基板吸收 [13]。隨即 1994 年美國 HP 公司 F. A. Kish 等人提出 GaP 透明基板結構，將吸光的 GaAs 基板蝕刻去除並利用晶圓鍵合技術靠凡得瓦力貼在透光的 GaP 基板上 [14]。1999 年美國 HP 公司 M. R. Krames 等人提出倒金字塔 (Truncated Inverted Pyramid, TIP) 結構，將元件側面斜切 35° 增加出光臨界角，封裝後 EQE=55% [15]。DBR 結構雖然可以反射入射光，但是大角度入射仍有很高的穿透率導致基板吸光，因此 1999 年洪瑞華教授提出薄膜金屬反射鏡 (Thin Film Metal Mirror) LED [16]，利用 Au/AuBe/SiO₂/Si 當作金屬反射鏡，其中 SiO₂/Si 導熱性佳但導電性差。Si 的高導熱性可以使元件產生的熱迅速排除，藉由觀察發光頻譜可以驗證高導熱性使得發光峰值波長沒有漂移。發光二極體各發展階段之元件結構如圖 1.1。

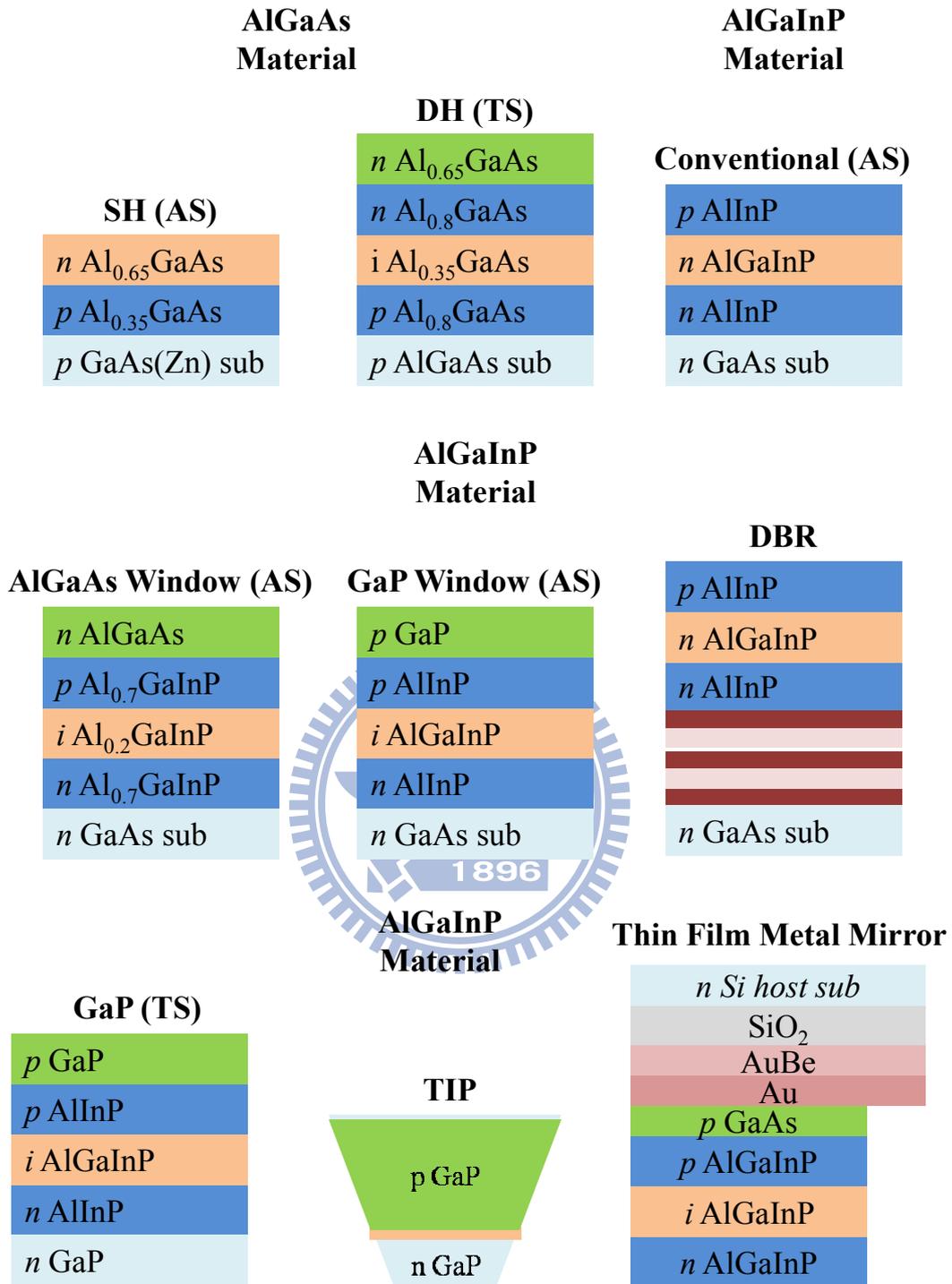


圖 1.1 發光二極體各發展階段之元件結構(I)。

$(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x})_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ 雖然具有寬廣能隙，但是當 $x > 0.53$ 會變為間接能隙材料。製作白光 LED 所需的紅光、綠光可由前面所述的

GaAsP:N 材料及 GaP:N 材料提供，唯獨以氮化物為主的藍光 LED 發展相對緩慢，主要因為沒有晶格匹配的基板導致成長磊晶層界面有應力產生，晶格缺陷過高無法提升發光效率。此外 p 型 GaN 的成長因為摻雜物(Mg)容易與氫氣產生鍵結而降低電洞濃度，直到 1986 年日本名古屋大學的 H. Amano 以 MOCVD 在低溫下成長 AlN 作為緩衝層，有效降低 GaN 與藍寶石基板之間的晶格缺陷 [17]。之後 Nichia 公司的 S. Nakamura 也以低溫成長 GaN 緩衝層，此階段 GaN 磊晶技術獲得重大突破。此外在 1989 年 H. Amano 以低能量的電子束照射 Mg 摻雜的 p -GaN [18] 以及 1992 年 S. Nakamura 以高溫熱退火方式順利解決了高摻雜濃度 p -GaN 製作的問題 [19]。1996 年 S. Nakamura 以藍光 LED 激發鈣鋁石榴:鈷(YaG:Ce)螢光粉製作全世界第一顆白光 LED，從此開啟白光 LED 照明的新頁。

藍寶石基板也有許多缺點，例如藍寶石基板常溫下的電阻率很大，導電率低無法用來製作傳統垂直結構 LED，必須將 p 型及 n 型電極製作於同一側，導致元件有效發光面積減少及橫向電流在元件轉角處形成電流壅塞(Current Crowding)。再來藍寶石基板的導熱性很差，大量的熱無法排除也會造成發光效率及元件壽命下降。由於高濃度 p -GaN 製作不易，傳統藍寶石基板 LED 晶片結構會在其電極鍍一層透明導電層(Transparent Conductive Layer, TCL)，除了可以達到歐姆

接觸外，高導電率可以增加電流擴散(Current Spreading)均勻性。常用的透明導電層為 Ni/Au 雙金屬層及氧化銦錫(ITO)，後者具有較高(90%)透光率。除了傳統藍寶石基板外尚有使用 SiC 為基板或薄膜金屬反射鏡結構。雖然 SiC 高導電性及導熱性可以用來製作垂直結構，成本卻也相對昂貴。薄膜金屬反射鏡則利用底層金屬的高反射率以及表面粗化來彌補薄膜所帶來側面出光的損失。

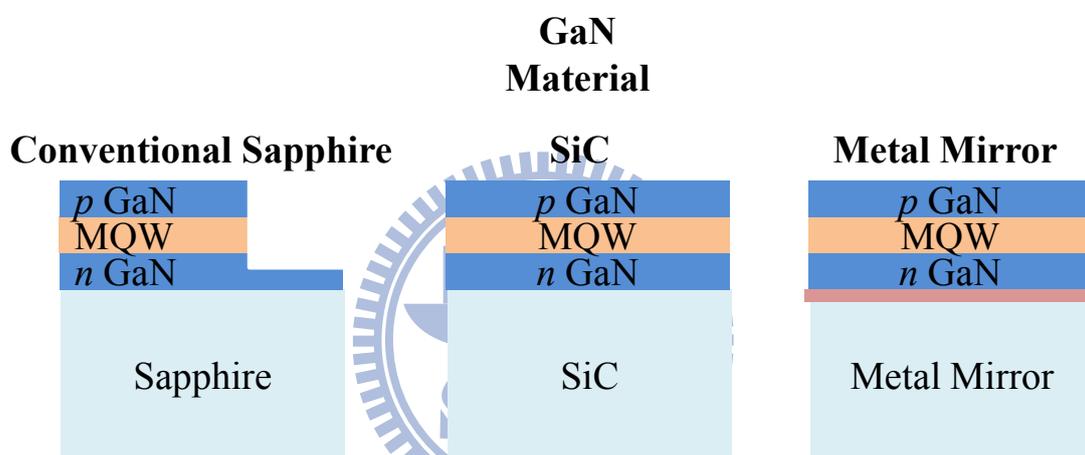


圖 1.2 發光二極體各發展階段之元件結構(II)。

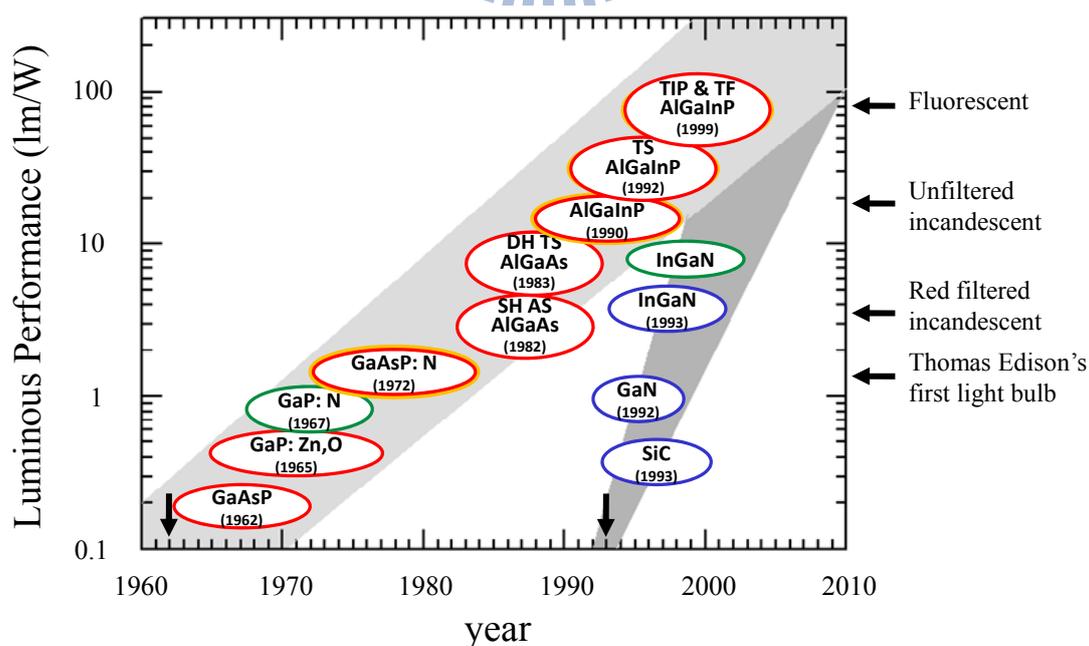


圖 1.3 發光二極體發展年表及其發光強度 [20]。

1-2 研究動機與目的

對於紅光波段的 AlGaAs 及 AlGaInP 材料，其高折射率 $n=3.6$ 造成光在半導體/空氣界面的臨界角只有 $\sin^{-1}(1/3.6)=16^\circ$ ，約 $1/4n^2=2\%$ 的光才可以離開元件，其餘的光在元件內部多次全反射後被主動層吸收或是金屬電極損耗導致很低的光萃取效率 (Light Extraction Efficiency, LEE)。許多增加光萃取效率的研究被提出例如晶片塑形 (Chip Shaping)、表面粗化結構 (Surface Texture)、圖形化基板 (Patterned Sapphire)、共振腔結構 (Resonant Cavity) 及光子晶體結構 (Photonic Crystal, PhC) 等。以下將對目前已提出的結構做介紹。

(1) 晶片塑形

傳統 LED 為長方體結構，即使多次全反射後入射角始終大於臨界角無法出光，因此可以藉由晶片幾何形狀來改變光的反射路徑。例如 1999 年美國 HP 公司 M. R. Krames 等人所提出的倒金字塔結構 [15] 及 Osram 公司斜切 SiC 基板使光萃取效率與長方體結構相比由 25 % 提升至 52 %。由此可知光子在元件中平均路徑長度的減少可以避免材料內部的損耗。

(2) 表面粗化結構

表面粗化可以減少半導體與空氣界面的全反射而提升光萃取效率。1973 年 Bergh 等人最先在美國專利中提出表面粗化的構想，並

且在元件底部製作反射鏡面 [21]。直到 1993 年加州大學的 I. Schnitzer 等人以自然蝕刻法(Natural Lithography)將 n -AlGaAs 表面粗化及運用雷射剝離技術(Laser Lift Off)將基板移除以製作反射鏡面，EQE 由 9% 提升至 30% [22]。對於 GaN LED 亦可以藉由 p -GaN 表面粗化來提升光萃取效率，然而 p -GaN 表面粗化會破壞其磊晶層使得透明導電層製作不易，因此藉由控制磊晶成長過程來形成自然表面粗化是較為可行的方法。

(3) 圖形化基板

GaN 磊晶層改以橫向磊晶的方式成長於圖形化基板上可以減少晶體缺陷密度，提高內部量子效率。亦可以藉由圖形化基板上的不平坦結構來改變光子反射路徑。2006 年 Nichia 公司利用圖形化基板及 ITO 透明導電層將白光 LED 的發光效率提高至 150lm/W [23]。

(4) 共振腔結構

通常共振腔結構包含一個主動層、共振腔體及兩個相鄰的布拉格反射鏡面。當主動層處於一個與發光波長尺寸相近的共振腔體中，光源經由鏡面來回反射在腔體形成共振或是駐波，藉由共振修正主動層是自發性放射過程使得只有特定波段的光可以射出元件，進而縮短光譜線寬。1992 年 Schubert 等人最先提出具體的共振腔結構 [24]。

(5) 光子晶體結構

週期性介電質結構可以對電磁波產生破壞性干涉，形成光子能隙 (Photonic Bandgap)。當光子晶體應用於主動層中，可以利用柏塞爾效應 (Purcell Effect) 來提高主動層的輻射復合速率 (Radiative Recombination Rate)，或是利用光子能隙的概念將波導模態 (Waveguide Mode) 耦合成輻射模態 (Radiation Mode)。當光子晶體製作於元件表面上可以利用週期性結構形成布拉格散射 (Bragg Scattering) 改變光子行進路線。

對於垂直結構發光二極體而言，電流擴散 (Current Spreading) 均勻性問題也會影響出光效率。高阻值材料導致電流不易擴散，大部份電流集中於電極正下方，電子電洞對在電極正下方復合使得輻射的光大部份被電極阻擋。因此低阻值高透光率材料例如 ITO 透明導電層普遍應用於目前的發光二極體元件。

為了解決上述垂直結構發光二極體所面臨的全反射及電流擴散均勻性問題，本論文提出金屬孔洞電極結構。金屬孔洞電極提供的布拉格散射機制可以使原先大於臨界角的入射光有機會藉由散射改變其反射路徑，進而提高光萃取效率。此外週期性金屬孔洞結構也能提供良好的電流擴散均勻性。

1-3 模擬結構

本論文提出薄膜金屬反射鏡 AlGaAs/GaAs/AlGaAs 異質接面發光二極體。其模擬結構與製程步驟參考 1999 年洪瑞華教授所提出的薄膜金屬反射鏡 AlGaInP 結構 [16]。希望藉由模擬簡單結構來分析金屬孔洞電極對於外部量子效率的影響。詳細的元件結構與製程步驟如圖 1.4、1.5。

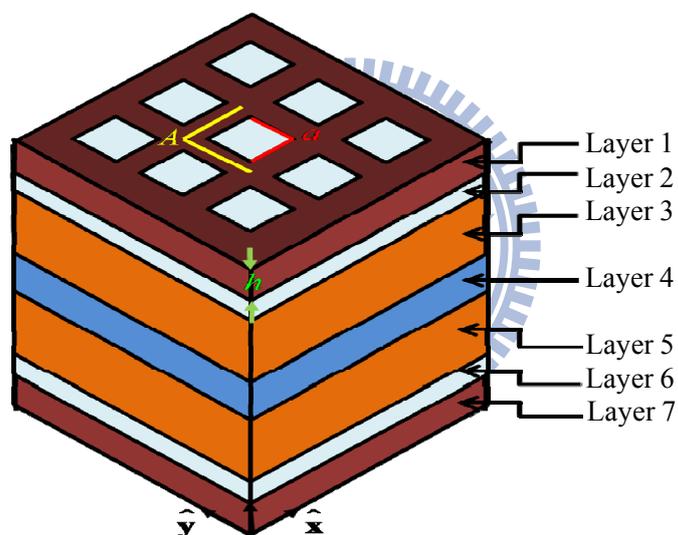
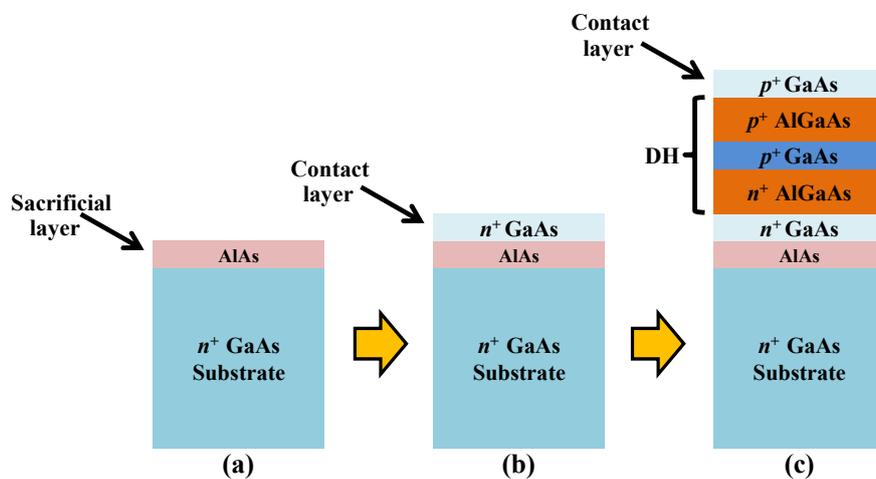
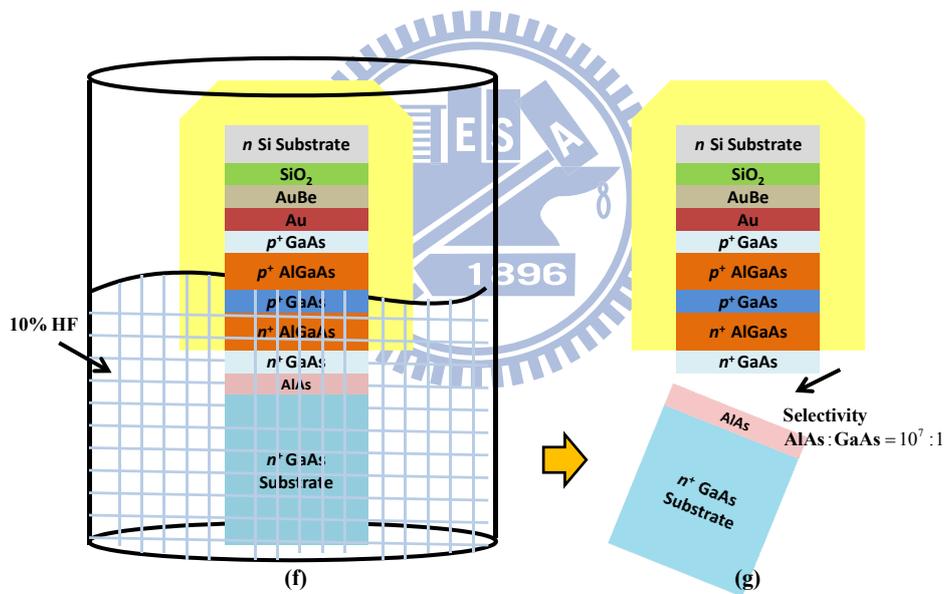
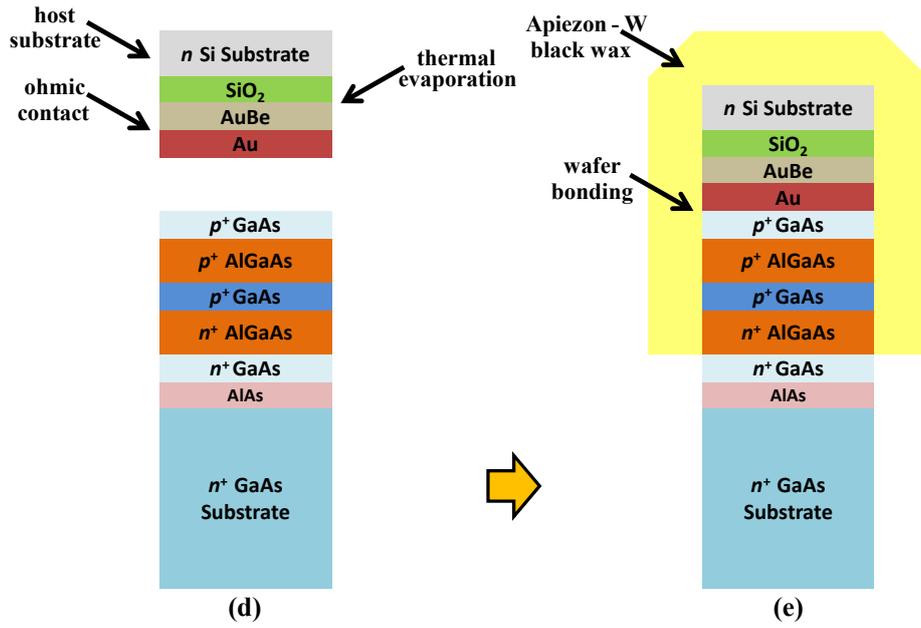


圖 1.4 薄膜金屬孔洞電極發光二極體元件結構。





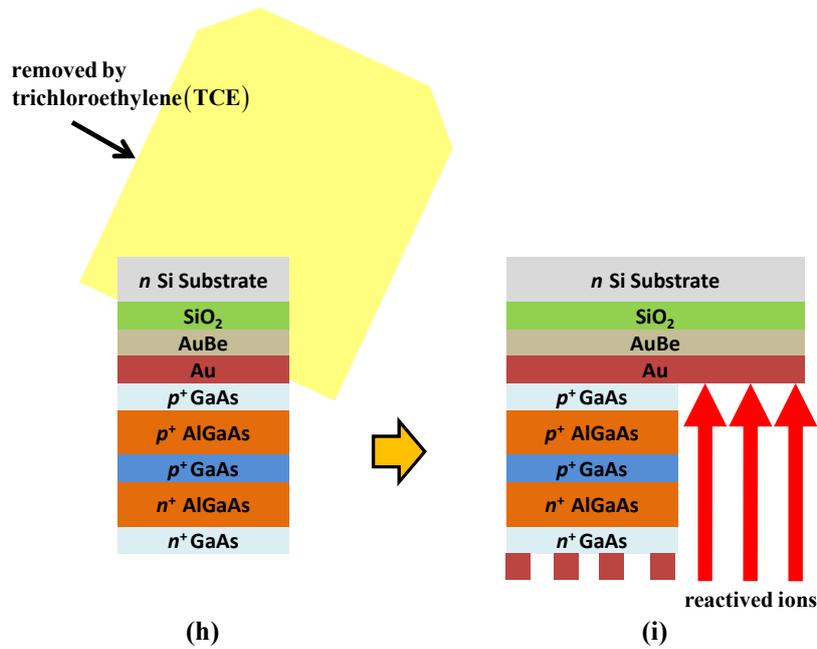


圖 1.5 薄膜金屬孔洞電極發光二極體製程步驟。

Layer 1 及 Layer 7 分別是 n 型金屬孔洞電極與整面 p 型電極。Layer 2 及 Layer 6 分別是厚度 10nm 、摻雜濃度 $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的 n 型及 p 型 GaAs 接觸層(Contact Layer)。Layer 3 及 Layer 5 分別是厚度 $2\mu\text{m}$ 、摻雜濃度 $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的 n 型及 p 型 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ 披覆層(Cladding Layer)。Layer 4 是厚度 100nm 、摻雜濃度 $8 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ 的 p 型 GaAs 主動層(Active Layer)。金屬孔洞電極週期長度為 A ，正方形孔洞長度為 a ，電極厚度為 h 。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 披覆層其 Al 比例 $x=0.4$ 高能障可以阻擋載子流出主動層形成漏電流。為了形成良好的歐姆接觸，使用低能隙且高摻雜濃度 $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的 GaAs 當作接觸層。然而接觸層的能隙比主動層發出光源的平均光子能量低會吸收損耗，因此接觸層的厚度越薄越好，以能達到良好歐姆接觸的厚度為上限。

第二章將針對 LED 的理論詳加介紹。2-1 節中求解馬克斯威爾方程式並配合傅立葉模型法(Fourier Modal Method, FMM)來得到金屬孔洞電極的波特特性。2-2 節中以 Newton-Jacobin Iteration Method 及 Newton-Raphson Method 數值分析技巧處理載子所需遵守的泊松方程式、穩態電子電洞連續方程式。2-3 節中以蒙地卡羅光跡追蹤法(Monte-Carlo Ray-Tracing Method)追蹤每顆光子在元件內部的傳播行為並計算元件的外部量子效率。此外當考慮光子循環效應下可用來計算主動層載子產生速率。

第三章將模擬不同條件下最佳化的外部量子效率，例如改變主動層厚度、改變金屬電極週期長度 A 與孔洞長度 a 、改變電極厚度 h 及孔洞內填充 SiO_2 與沒有填充 SiO_2 的比較。此外也將表面粗化 LED 結構的表面粗糙度最佳化，同時藉由模擬傳統平面式及表面粗化結構來與金屬孔洞電極發光二極體的外部量子效率做比較。

1-4 發光效率

LED 外部量子效率與載子注入效率(Injection Efficiency)、內部量子效率(Internal Quantum Efficiency)、光萃取效率(Extraction Efficiency)有關。考慮光子循環效應(Photon Recycling Effect)下，我們額外定義光子循環效率(Photon Recycling Efficiency)。以下將分別介紹這些效

率的基本定義。

(1) 載子注入效率 η_{inj}

載子注入效率為流入主動層內部的載子數與電極注入載子數的比值。

(2) 內部量子效率 η_{IQE}

流入主動層內部的載子部份會輻射復合發光，另一部分非輻射復合產生熱。其中輻射復合光子數與電子電洞對總復合數的比值稱為內部量子效率。

(3) 光萃取效率 η_{xp}

輻射復合的光子在元件內部經過多次全反射下部份的光子會逃脫元件，部份的光子會被元件內部的損耗機制所消滅，其中逃脫元件的光子數與輻射復合總光子數的比值稱為光萃取效率。

(4) 光子循環效率 η_{pr}

元件內部的損耗機制包含金屬電極的損耗、接觸層的損耗、寄生損耗(Parasitic Loss)及主動層的吸收。本論文中定義光子循環效率為被主動層吸收的光子數與無法逃脫元件的總光子數之比值。

LED 的外部量子效率 η_{EQE} 與上面所提的四種效率有關，其關係如圖 1.6。則

$$\eta_{\text{EQE}} = \frac{\eta_{\text{inj}} \eta_{\text{IQE}} \eta_{\text{xp}}}{1 - \eta_{\text{IQE}} \eta_{\text{pr}} (1 - \eta_{\text{xp}})}, \quad (1.1)$$

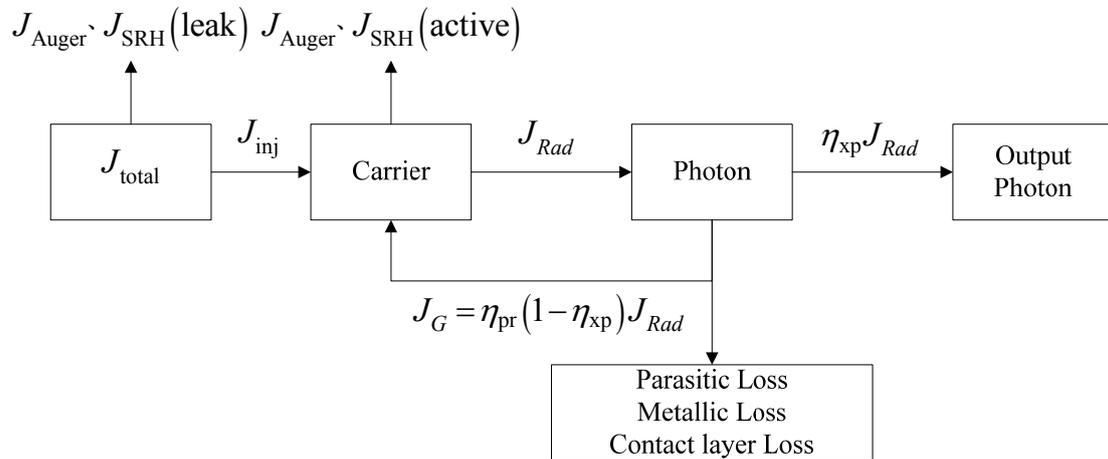


圖 1.6 外部量子效率計算圖像。



第二章 理論

2-1 光性

光以波向量(Wave Vector)的方向在元件內部傳播，除了 *n*-type GaAs 接觸層與其金屬電極界面外，不同材料界面的反射率與穿透率由菲涅爾方程式(Fresnel's Equation)決定。假設橫電場(TE)與橫磁場(TM)各貢獻一半的偏振方向，不同偏振方向的反射率與穿透率如下。

$$R_{TE} = \left(\frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \right)^2, \quad T_{TE} = 1 - R_{TE}, \quad (2.1.a)$$

$$R_{TM} = \left(\frac{n_1 \cos \theta_2 - n_2 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_2 + n_2 \cos \theta_1} \right)^2, \quad T_{TM} = 1 - R_{TM}, \quad (2.1.b)$$

其中 n_1 、 n_2 代表入射與折射介質折射率， θ_1 、 θ_2 代表入射角與折射角。

針對傳統平面式、表面粗化及金屬孔洞電極發光二極體 *n*-type GaAs 接觸層與其金屬電極之間光性的處理技巧將在 2-1-1、2-1-2、2-1-3 節中討論。

2-1-1 傳統平面式發光二極體(Planar LED)

傳統平面式發光二極體如圖 2.1，*p*-type 與 *n*-type 金屬電極通常以 Au/AuBe 及 Au/NiAuGe 形成歐姆接觸。折射率 $n = 0.199 + 5.84i$ 、入射光波長 $\lambda = 0.85 \mu m$ 則電極的吸收係數 $\alpha = \frac{2\pi}{\lambda} \kappa = 4.317 \times 10^7 cm^{-1}$ 。

模擬傳統平面式發光二極體金屬電極界面時仍以菲涅爾方程式計算反射率與穿透率，並假設一旦光穿透進入電極內部即形成金屬損耗。

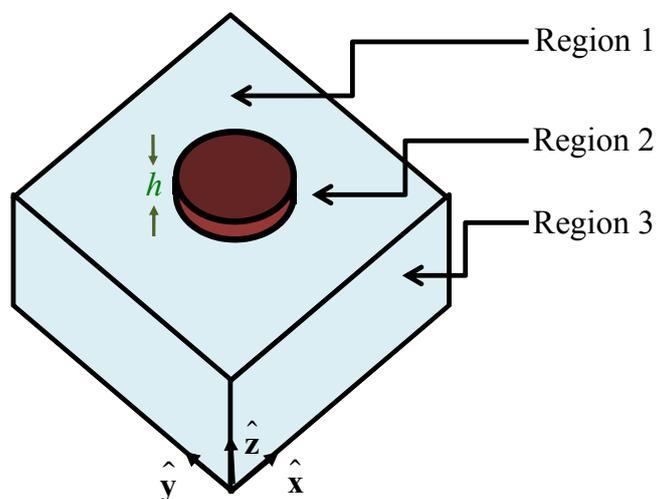


圖 2.1 傳統平面式發光二極體。區域一是空氣層；區域二是直徑 $100\mu\text{m}$ 的金(Au)電極；區域三是長寬各 $300\mu\text{m}$ 的 n -type GaAs 接觸層。

2-1-2 表面粗化發光二極體(Surface Texture LED)

表面粗化發光二極體如圖 2.2，與平面式發光二極體的差異在於表面粗化二極體 n -type GaAs 接觸層與空氣之間具有粗糙界面。在球座標系 $\phi = \text{constant}$ 下，其粗糙度由 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 表示， θ_n 是粗糙界面法向量 $\hat{\mathbf{n}}_{\text{texture}}$ 與平面法向量 $\hat{\mathbf{n}}_{\text{planar}}$ 的夾角如圖 2.3。入射角相對於平面法向量为 θ_i ，相對於粗糙界面法向量为 $\theta_i - \theta_n$ 。因此表面粗糙結構的好處在於當入射角大於臨界角，相對於平面而言會全反射，但入射在粗糙界面的不同位置會有不同的法向量，有機會改變入射角使之小於臨界角。在 $\phi = \text{constant}$ 或 $\theta_n = \text{constant}$ 下，不同法向量對應到不同的機率分佈，此機率分佈由入射光與粗糙界面之間的截面積

$S(\theta_i, \theta_n) = \cos(\theta_i - \theta_n)$ 、 $S(\theta_i, \phi) = \cos\phi$ 及表面粗糙度 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 、 $\cos^{n_{st}} \phi$ 所決定。

粗糙界面法向量的選取可以視為將平面法向量轉動 θ_n 角，先固定 ϕ 角轉動 θ_n 角，再固定 θ_n 角轉動 ϕ 角，同時定義 θ_n 、 ϕ 轉動的正負號方向如圖 2.4。一旦決定粗糙界面法向量再利用菲涅爾方程式計算反射率與穿透率 [25]。其詳細流程如下：

(1) 在 $\phi = \text{constant}$ 下，決定表面粗糙度 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 的 n_{st} 值，其中 $-\pi/2 < \theta_n < \pi/2$

(2) 在 $\phi = \text{constant}$ 下，入射光對應不同粗糙界面位置所看到的等效截面積 $S(\theta_i, \theta_n) = \cos(\theta_i - \theta_n)$ ，其中 $\theta_i - \pi/2 < \theta_n < \theta_i + \pi/2$

(3) 在 $\phi = \text{constant}$ 下轉動 θ_n ，求不同 θ_n 所對應的機率分佈並且歸一化：

$$P(\theta_n) = \kappa_i \cos^{n_{st}} \theta_n \times \cos(\theta_i - \theta_n), \text{ 其中 } \theta_i - \pi/2 < \theta_n < \pi/2$$

$$\text{歸一化係數 } \kappa_i = \frac{1}{\int_{\theta_i - \pi/2}^{\pi/2} \cos^{n_{st}} \theta_n \times \cos(\theta_i - \theta_n) d\theta_n},$$

(4) 在 $\theta_n = \text{constant}$ 下轉動 ϕ ，求不同 ϕ 所對應的機率分佈並且歸一化：

$$P(\phi) = \kappa_t \cos^{n_{st}+1} \phi, \text{ 其中 } -\pi/2 < \phi < \pi/2$$

$$\text{歸一化係數 } \kappa_t = \frac{1}{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^{n_{st}+1} \phi d\phi},$$

(5) 擲兩個介於 0~1 的均勻亂數 ρ_i 、 ρ_t ，藉此求解 θ_n 、 ϕ 來決定粗糙界面法向量

$$\rho_i = \int_{\theta_i - \pi/2}^{\theta_n} P(\theta_n') d\theta_n',$$

$$\rho_t = \int_{-\pi/2}^{\phi} P(\phi') d\phi',$$

(6) 利用菲涅爾方程式計算反射率與穿透率

接下來探討 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 函數所代表的表面粗糙度圖像如圖 2.5，當 n_{st} 值越大 (~5000) 越接近於平面，也就是當 $\theta_n = 0^\circ$ 時 $\cos^{5000} \theta_n = 1$ ，其餘角度的 θ_n 都會使 $\cos^{5000} \theta_n = 0$ 。 n_{st} 值越小表面彎曲程度越大，例如 $n_{st} = 50$ ，小角度的 θ_n 可以使 $\cos^{50} \theta_n \neq 0$ ，大角度的 θ_n 仍會使 $\cos^{50} \theta_n = 0$ 。當 $n_{st} = 1$ 時表面最彎曲可以選取任意角度的粗糙界面法向量。本論文將模擬不同表面粗糙度 n_{st} 值來取得最佳化的結果，並且預期當 n_{st} 值越大其結果越接近於傳統平面式發光二極體的結果。

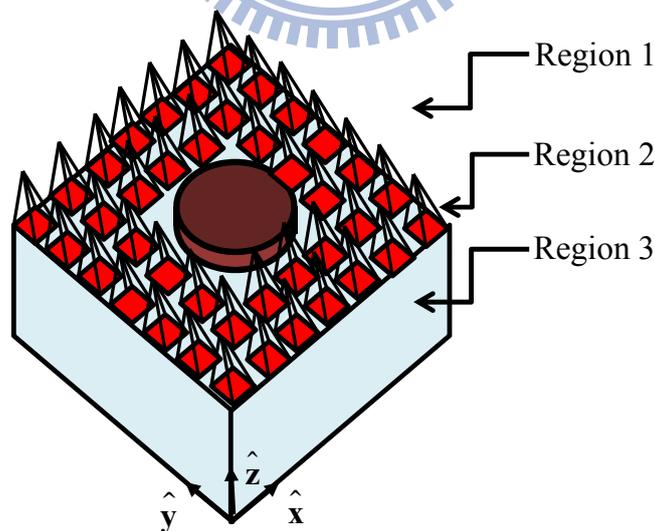


圖 2.2 表面粗化發光二極體。區域一是空氣層；區域二是直徑 $100\mu\text{m}$ 的金(Au)電極；區域三是長寬各 $300\mu\text{m}$ 的 *n*-type GaAs 接觸層。*n*-type GaAs 接觸層與空氣層之間具有粗糙界面。

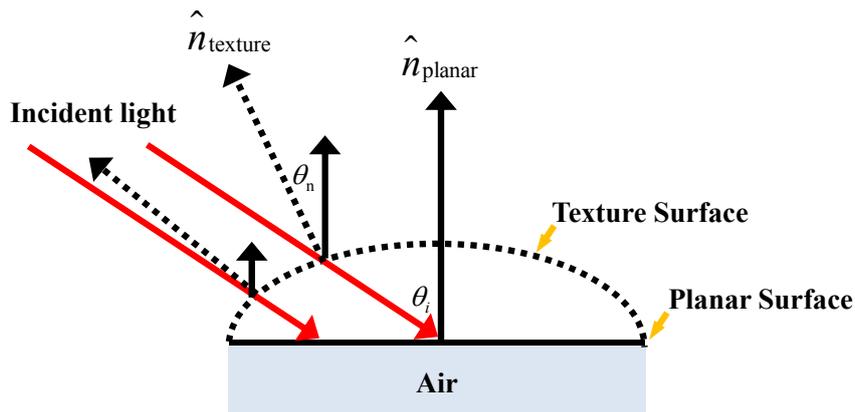


圖 2.3 表面粗化發光二極體示意圖。在 $\phi = \text{constant}$ 下界面粗糙度由 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 表示，其中 θ_n 是粗糙界面法向量 $\hat{\mathbf{n}}_{\text{texture}}$ 與平面法向量 $\hat{\mathbf{n}}_{\text{planar}}$ 的夾角。入射角相對於平面法向量為 θ_i ，相對於粗糙界面法向量為 $\theta_i - \theta_n$ 。

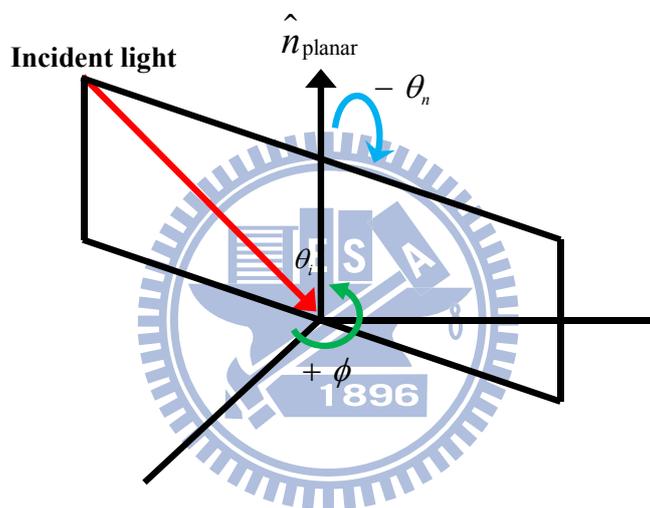


圖 2.4 平面法向量旋轉方向。先固定 ϕ 角轉動 θ_n 角，再固定 θ_n 角轉動 ϕ 角。在 $\phi = \text{constant}$ 下與入射方向同向轉 θ_n 定義為負，反之為正。在 $\theta_n = \text{constant}$ 下繞 +z 軸逆時針轉 ϕ 定義為正，反之為負。

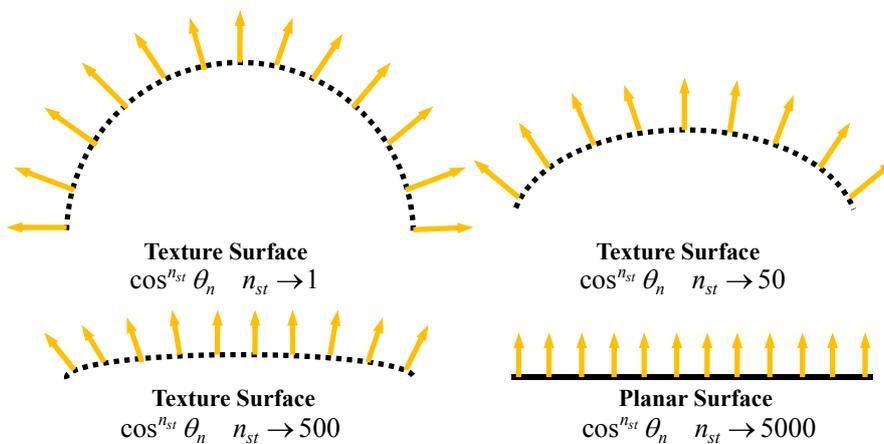


圖 2.5 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 表面粗糙度。 n_{st} 值越大 (~5000) 越接近於平面， n_{st} 值越小表面彎曲程度越大，入射光所看到的粗糙界面法向量範圍也越廣。

2-1-3 金屬孔洞電極發光二極體

當入射光在 n -type 接觸層與金屬孔洞電極界面時，必須考慮金屬孔洞電極所提供的散射機制，不能再以簡單的菲涅爾方程式來決定界面的反射率與穿透率，因此必須從馬克斯威爾方程式著手來解此系統的波動行為。金屬孔洞電極結構如圖 2.6。

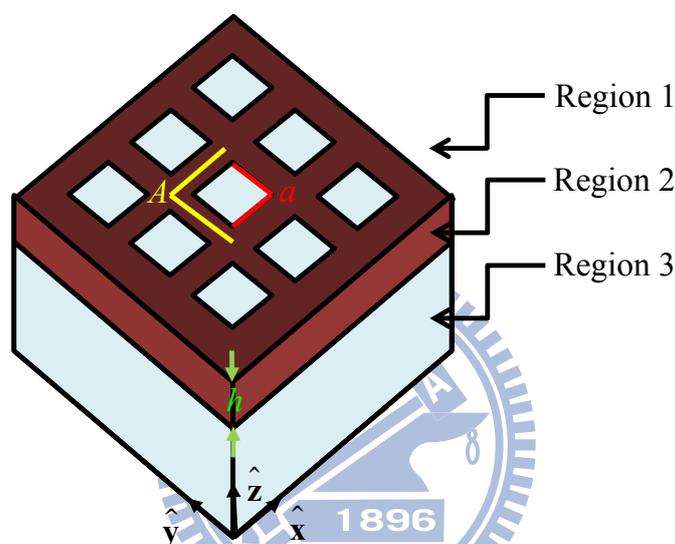


圖 2.6 金屬孔洞電極結構。區域一是空氣層；區域二是金屬孔洞電極；區域三是 n -type GaAs 接觸層。 A 是週期長度， a 是正方形孔洞長度，金屬厚度為 h 。

我們將整個空間切割成三個區域分別是區域一空氣層、區域二金屬孔洞電極層及區域三 n -type GaAs 接觸層， A 是週期長度， a 是正方形孔洞長度，金屬厚度為 h 。使用平面波為基底去展開區域一及區域二的電磁波，而在區域二使用傅立葉模型法解出本徵態(eigenstate)，再利用這些本徵態當基底去線性疊加區域二的電磁波。1997 年李立峰教授提出改良的傅立葉模型法後解決了傅立葉模型法計算金屬結

構會發散的問題 [26]。

由於計算結構具有二維的週期性，故區域一及區域三的平面波基底必須滿足布洛赫型式(Bloch Form)，意即平面波的基底在 x-y 平面上的波向量 k_x 、 k_y 只能是入射波的平行波向量 k_{x0} 、 k_{y0} 加上一個反晶格向量(Reciprocal Lattice Vector)。則

$$k_x = k_{x0} + \frac{2\pi m}{A}, \quad (2.2.a)$$

$$k_y = k_{y0} + \frac{2\pi n}{A}, \quad (2.2.b)$$

其中 k_x 、 k_y 分別是 x 與 y 方向上的波向量，入射波及第零階的散射波所對應到的 $(m,n)=(0,0)$ ，意即 k_{x0} 、 k_{y0} 是入射波及第零階散射波的水平波向量。 z 方向的波向量 $k_z = \sqrt{\epsilon_{I,III} (\omega/c)^2 - k_x^2 - k_y^2}$ ， ω 是光的角頻率， c 是光的真空速度， $\epsilon_{I,III}$ 分別是區域一或區域三的介電常數。當入射光以 θ 、 ϕ 角度入射此金屬孔洞電極時，入射光波向量可表示為：

$$k_{x0} = \sqrt{\epsilon_{III}} \frac{\omega}{c} \sin \theta \cos \phi, \quad (2.3.a)$$

$$k_{y0} = \sqrt{\epsilon_{III}} \frac{\omega}{c} \sin \theta \sin \phi, \quad (2.3.b)$$

將各區域的電磁波以其對應的基底展開，加上各區域界面的平行電場、磁場邊界連續條件可以解出各區域基底展開係數 \mathbf{A}_1 、 \mathbf{A}_2 、 \mathbf{A}_3 、 \mathbf{B}_1 、 \mathbf{B}_2 、 \mathbf{B}_3 。如圖 2.7

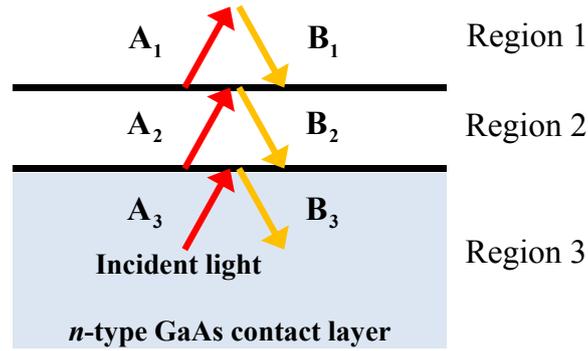


圖 2.7 各區域基底展開係數。A₁、B₁是區域一的展開係數；A₂、B₂是區域二的展開係數；A₃、B₃是區域三的展開係數。各展開係數之間的關係由界面的水平電場、磁場連續條件決定。

定義穿透率及反射率分別為透射光及反射光沿 z 軸方向的能量流除以入射光沿 z 軸方向的能量流。透射光與反射光需先滿足 $k_z = \sqrt{\epsilon_{l,III}(\omega/c)^2 - k_x^2 - k_y^2} > 0$ 的條件，再對不同 (m,n) 模態所貢獻的穿透率及反射率進行加總，同時也可以得知不同角度入射光的金屬損耗。

傳統平面式發光二極體必須遵守入射角等於反射角，也就是當入射角大於臨界角則光會在元件內部全反射難以逃脫元件。金屬孔洞電極最大的好處在於其提供的散射機制，不同 (m,n) 模態反射光具有不同水平波向量 k_x 、 k_y ，即可換算出不同模態的反射角。

本論文在模擬金屬孔洞發光二極體時，針對不同入射角 θ ($0 \sim 89^\circ$)、 ϕ ($0 \sim 89^\circ$) 先建立一個 90×90 筆反射率與穿透率的資料庫，以便之後在執行蒙地卡羅光跡追蹤法時使用。此外對於各入射角而言會有不同模態的反射角及其對應的反射率，將所有不同模態的反射率

歸一化同時擲一個介於 0~1 之間的均勻亂數，便可以決定反射角。在大量的光子統計下其反射角的分佈就會對應到各反射率之間的比例。

2-2 電性

當兩異質半導體材料接觸時，在未外加偏壓的情況下費米能階需達成平衡，材料間的傳導帶與價電帶需維持固定的偏差值(Band Offset)。載子達到熱平衡後總電流為零，異質界面處會形成空乏區以及能帶彎曲現象。外加偏壓的情況下當載子達到穩態，總電流為一定值。

為了描述整個能帶彎曲現象必須引入載子所需遵守的基本方程式，熱平衡下遵守泊松方程式(Poisson Equation)，穩態下遵守泊松方程式、電子電洞連續方程式(Continuity Equations)，並藉由數值分析方法計算能帶圖(Band Diagram)來了解元件內部載子的行為。

2-2-1 基本方程式

欲計算界面能帶彎曲現象，需解一維非線性泊松方程式：

$$-\frac{d}{dx} \epsilon_r(x) \frac{d}{dx} \phi(x) = \frac{q [p(x) - n(x) + N_d^+(x) - N_a^-(x)]}{\epsilon_0}, \quad (2.4)$$

外加偏壓下，除了計算能帶彎曲現象外欲知元件內部電流電壓特

性，需加上穩態電子電洞連續方程式：

$$\frac{dJ_n(x)}{dx} = q[R(x) - G(x)], \quad (2.5)$$

$$\frac{dJ_p(x)}{dx} = -q[R(x) - G(x)], \quad (2.6)$$

其中

$$E_c(x) = E_{c0} - q\phi(x), \quad E_v(x) = E_{v0} - q\phi(x), \quad (2.7.a)$$

$$n(x) = N_c(x)F_{1/2}(\eta_c), \quad \eta_c \equiv (E_{Fc}(x) - E_c(x))/k_B T, \quad (2.7.b)$$

$$p(x, \phi) = N_v(x)F_{1/2}(\eta_v), \quad \eta_v \equiv (E_v(x) - E_{Fv}(x))/k_B T, \quad (2.7.c)$$

$$N_d^+ = N_d / \left[1 + g_d e^{(E_{Fc} - E_d)/k_B T} \right], \quad (2.7.d)$$

$$N_a^- = N_a / \left[1 + g_a e^{(E_a - E_{Fv})/k_B T} \right], \quad (2.7.e)$$

電子電洞對的復合機制主要為輻射復合(Radiative)、歐傑復合(Auger) [27]及蕭克萊-瑞德-霍爾復合(Shockley-Read-Hall, SRH) [28]。

本論文輻射復合速率並非以頻譜的形式表示，而是對頻譜積分過後的結果。歐傑復合則考慮 CHHS 及 CHCC 的情況。則

$$R(x) = R_{\text{Rad}}(x) + R_{\text{Aug}}(x) + R_{\text{SRH}}(x), \quad (2.8)$$

其中

$$R_{\text{Rad}}(x) = B[n(x)p(x) - n_i^2], \quad (2.9.a)$$

$$R_{\text{Aug}}(x) = [C_p p(x) + C_n n(x)][n(x)p(x) - n_i^2], \quad (2.9.b)$$

$$R_{\text{SRH}}(x) = \frac{n(x)p(x) - n_i^2}{\tau_n [p(x) + n_i] + \tau_p [n(x) + n_i]}, \quad (2.9.c)$$

由於主動層輻射平均光子能量約 $E_g + 3k_B T/2$ 的光，因此當光子在元件內部反射過程中有可能被主動層再吸收產生電子電洞對，此再吸收現象稱為光子循環效應(Photon Recycling Effect) [29,30]，所貢獻的載子產生速率(Generation Rate)必須在穩態電子電洞連續方程式中考慮，載子產生速率的計算方式將在之後章節中詳細說明。

穩態電子電洞連續方程式中，電子電洞電流需考慮以下兩種模型：漂移擴散電流模型及熱激發電流模型。

2-2-1-1 漂移擴散電流模型(Drift-Diffusion Current)

漂移擴散電流由濃度梯度所造成的擴散電流及電場漂移所造成的漂移電流所組成。則

$$\mathbf{J}_n(x) = -qn(x)\mu_n \frac{d\phi(x)}{dx} + qD_n \frac{dn(x)}{dx}, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{J}_p(x) = -qp(x)\mu_p \frac{d\phi(x)}{dx} - qD_p \frac{dp(x)}{dx}, \quad (2.11)$$

當電子電洞濃度以費米-狄拉克分佈(Fermi-Dirac Distribution)表示時，費米-狄拉克積分方程式(Fermi-Dirac Integral)的微分形式 [31] 及電子(電洞)擴散係數與電子(電洞)遷移率的關係 [32]可表示如下。

$$\frac{dF_{1/2}(\eta)}{d\eta} = F_{-1/2}(\eta), \quad (2.12)$$

$$D_i = \mu_i \frac{k_B T}{q} \frac{F_{1/2}(\eta_i)}{F_{-1/2}(\eta_i)}, \quad i = n, p, \quad (2.13)$$

電子電洞在任何位置都達到穩態平衡後有各自的費米-狄拉克分佈，將(2.12)、(2.13)代入(2.10)、(2.11)，可將漂移擴散電流模型改寫成準費米能階(quasi fermi level)的型式，準費米能階會是位置的連續函數。則

$$\mathbf{J}_n(x) = n(x)\mu_n \frac{dE_{Fc}(x)}{dx} = -qn(x)\mu_n \frac{d\phi_{Fc}(x)}{dx}, \quad (2.14)$$

$$\mathbf{J}_p(x) = p(x)\mu_p \frac{dE_{Fv}(x)}{dx} = -qp(x)\mu_p \frac{d\phi_{Fv}(x)}{dx}, \quad (2.15)$$

2-2-1-2 熱激發電流模型(Thermionic Emission Current)

兩異質界面若彼此之間傳導帶及價電帶的偏差值 $> 2k_B T$ ，則漂移擴散電流模型無法描述載子在界面遇到能障阻擋時的行為。只有高能量的載子可以通過能障且在能障區域的載子不一定符合費米-狄拉克分佈，準費米能階會分裂不再是連續函數，因此我們必須改以熱激發電流模型來計算界面電流。

針對熱激發電流模型，我們也做了一些假設如下：

- (1) 能量高於能障高度的載子可以完全通過能障，不會被能障反射。
- (2) 能量低於能障高度的載子無法通過能障，且沒有穿隧現象發生。

熱激發電流模型的機制如圖 2.8，對於異質材料 GaAs 及 AlGaAs，我們在異質界面兩側定義傳導帶能量 $E_{c1}(\text{interface})$ $E_{c2}(\text{interface})$ ，準費米能階 $E_{Fc1}(\text{interface})$ 、 $E_{Fc2}(\text{interface})$ ，而界面兩側隨著不同位置

分別有不同的傳導帶能量 $E_{c1}(x)$ 、 $E_{c2}(x)$ 及準費米能階 $E_{Fc1}(x)$ 、 $E_{Fc2}(x)$ 。當第一區傳導帶的電子想要通過界面到達第二區傳導帶時，電子的能量必須高於界面能障高度 $\Delta\phi_1$ ，相同的當第二區傳導帶的電子想要通過界面到達第一區傳導帶時，必須高於界面能障高度 $\Delta\phi_2$ ，其電子電洞熱激發電流計算如下[33,34]。

$$\mathbf{J}_{n1 \rightarrow 2} = A_{n1}^*(\text{interface}) T^2 F_1 \left(\frac{E_{Fc1}(\text{interface}) - \max(E_{c1}(\text{interface}), E_{c2}(\text{interface}))}{k_B T} \right)$$

$$\mathbf{J}_{n2 \rightarrow 1} = A_{n2}^*(\text{interface}) T^2 F_1 \left(\frac{E_{Fc2}(\text{interface}) - \max(E_{c1}(\text{interface}), E_{c2}(\text{interface}))}{k_B T} \right)$$

第一區流入第二區的淨電子熱激發電流為

$$\mathbf{J}_{n1 \rightarrow 2}^{net} = \mathbf{J}_{n1 \rightarrow 2} - \mathbf{J}_{n2 \rightarrow 1}, \quad (2.16)$$

對於電洞熱激發電流亦可藉由相同模型推導。則

$$\mathbf{J}_{p1 \rightarrow 2} = A_{p1}^*(\text{interface}) T^2 F_1 \left(\frac{\min(E_{v1}(\text{interface}), E_{v2}(\text{interface})) - E_{Fv1}(\text{interface})}{k_B T} \right)$$

$$\mathbf{J}_{p2 \rightarrow 1} = A_{p2}^*(\text{interface}) T^2 F_1 \left(\frac{\min(E_{v1}(\text{interface}), E_{v2}(\text{interface})) - E_{Fv2}(\text{interface})}{k_B T} \right)$$

第二區流入第一區的淨電洞熱激發電流為

$$\mathbf{J}_{p2 \rightarrow 1}^{net} = \mathbf{J}_{p2 \rightarrow 1} - \mathbf{J}_{p1 \rightarrow 2}, \quad (2.17)$$

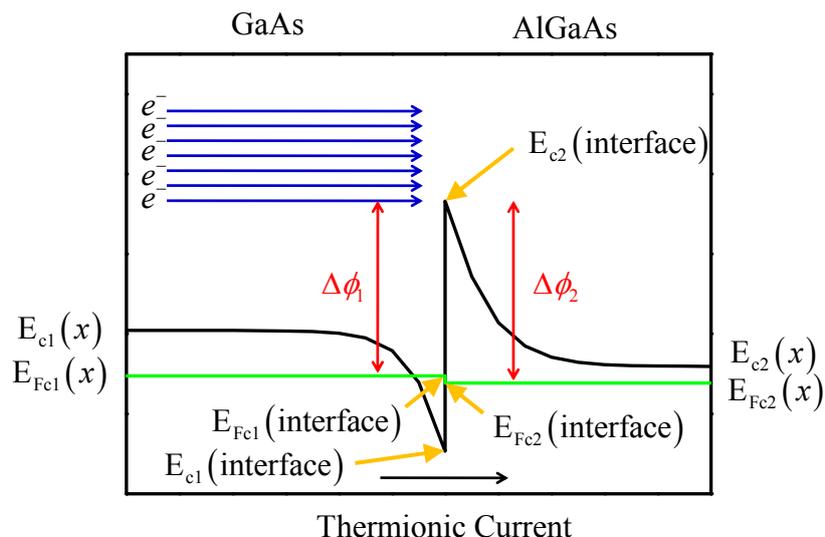


圖 2.8 熱激發電流模型。電子由第一區流入第二區或第二區流入第一區，能量必須高於 $\Delta\phi$ 或 $\Delta\phi_2$ ，在界面處準費米能階 $E_{Fc1}(\text{interface})$ 、 $E_{Fc2}(\text{interface})$ 不再連續會分裂開。

2-2-2 數值方法(Numerical Method)

計算2-2-1節中載子所遵守的基本方程式時，由於等號兩側與 ϕ 、 E_{Fc} 、 E_{Fv} 有關無法直接積分求解，需將空間切割成離散的點。點切的越細越能準確的描述能帶彎曲情形，但也相對耗時。本論文引入不等分割切點法，對於能帶變化劇烈的區域切割間距較小，平坦的區域間距較大，如此可準確的描述能帶彎曲程度及省時。在材料內部與材料界面地方切割點的方式也有所不同，如圖 2.9、2.10。界面的地方定義兩個間距非常小約 $10^{-12}cm$ 的點，兩個很靠近的點之間的電流為熱激發電流，兩點數值上的差異(如 ΔE_c 、 ΔE_v 、 ΔE_{Fc} 及 ΔE_{Fv})可充份描述界面上不連續的情形。

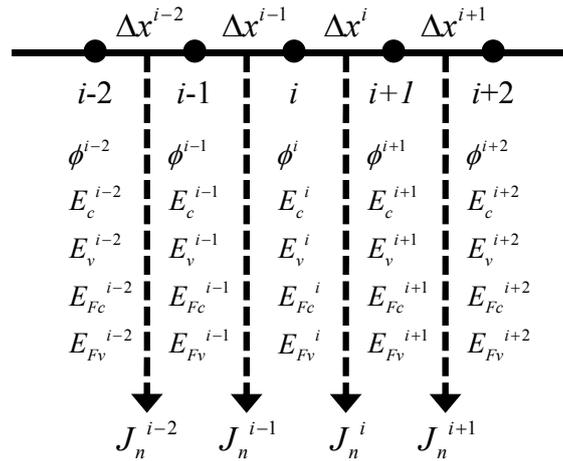


圖 2.9 材料內部切割點的方式。位能、傳導帶能量、價電帶能量、準費米能階定義在點上，電流定義在兩點之間。

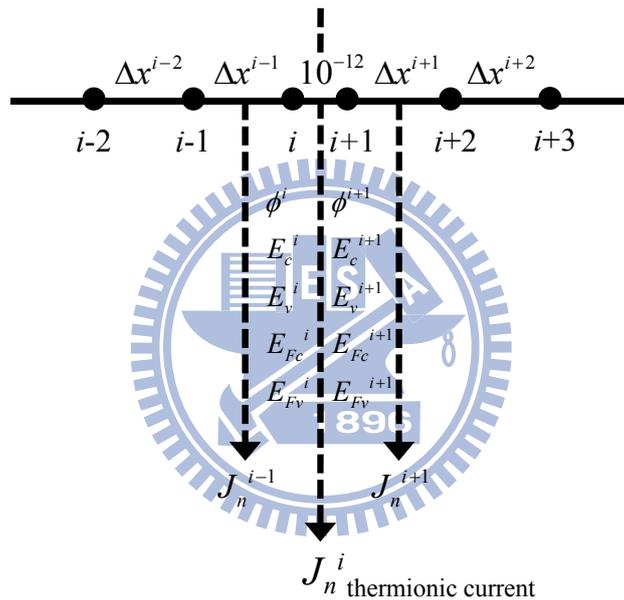


圖 2.10 材料界面上切割點的方式。在界面上定義兩個間距非常小約 $10^{-12}cm$ 的點，兩個很靠近的點之間的電流 J_n^i 為熱激發電流，而 J_n^{i-1} 、 J_n^{i+1} 為漂移擴散電流。兩點數值的差異(如 ΔE_c 、 ΔE_v 、 ΔE_{Fc} 、 ΔE_{Fv})可充份描述界面上不連續的情形。

由於空間切割成離散點，則 2-2-1 節中所描述的基本方程式必須改寫成離散的形式，同時分為下列兩個區域來改寫：材料內部區及材料界面區。

材料內部區：

$$\frac{\left[\frac{\varepsilon_i(\phi_{i+1} - \phi_i)}{\Delta x^i} - \frac{\varepsilon_{i-1}(\phi_i - \phi_{i-1})}{\Delta x^{i-1}} \right]}{\frac{(\Delta x^i + \Delta x^{i-1})}{2}} = -\frac{q[p(i) - n(i) + N_d^+(i) - N_a^-(i)]}{\varepsilon_0}, \quad (2.18)$$

$$\frac{(\mathbf{J}_n^i - \mathbf{J}_n^{i-1})}{\frac{(\Delta x^i + \Delta x^{i-1})}{2}} = q[R(i) - G(i)], \quad (2.19)$$

$$\frac{(\mathbf{J}_p^i - \mathbf{J}_p^{i-1})}{\frac{(\Delta x^i + \Delta x^{i-1})}{2}} = -q[R(i) - G(i)], \quad (2.20)$$

材料界面區：

$$\frac{\varepsilon_i(\phi_{i+1} - \phi_i)}{\Delta x^i} = \frac{\varepsilon_{i-1}(\phi_i - \phi_{i-1})}{\Delta x^{i-1}}, \quad (2.21)$$

$$\mathbf{J}_n^{i-1} = \mathbf{J}_n^{i+1} = \mathbf{J}_n^i \text{ thermionic}, \quad (2.22)$$

$$\mathbf{J}_p^{i-1} = \mathbf{J}_p^{i+1} = \mathbf{J}_p^i \text{ thermionic}, \quad (2.23)$$

其中

$$\mathbf{J}_n^i = -q \frac{[n(i) + n(i+1)](\mu_n^i + \mu_n^{i+1})(\phi_{Fc}^{i+1} - \phi_{Fc}^i)}{4\Delta x^i},$$

$$\mathbf{J}_p^i = -q \frac{[p(i) + p(i+1)](\mu_p^i + \mu_p^{i+1})(\phi_{Fv}^{i+1} - \phi_{Fv}^i)}{4\Delta x^i},$$

$$\mathbf{J}_n^i \text{ thermionic} = \mathbf{J}_{n1 \rightarrow 2}^{net},$$

$$\mathbf{J}_p^i \text{ thermionic} = \mathbf{J}_{p2 \rightarrow 1}^{net},$$

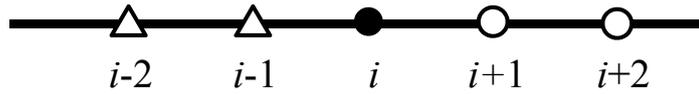
寫下各點所對應的離散基本方程式後，必須使用數值方法來求得各點的 ϕ 、 E_{Fc} 、 E_{Fv} 。以下介紹兩種常用的數值方法: Newton-Jacobin Iteration Method 及 Newton-Raphson Method [35]

2-2-2-1 Newton-Jacobin Iteration Method (迭代法)

在材料內部以(2.18)~(2.20)解 ϕ 、 E_{Fc} 、 E_{Fv} ，在材料界面以(2.21)電場的連續性解 ϕ ，以(2.22)、(2.23)電子電洞電流流入等於流出界面來解界面兩側的 E_{Fc} 、 E_{Fv} 。

定義 $\phi(x) = E_c(x) - E_c(1)$ ，位能的零點定義在初始點傳導帶能量的位置，任何位置的位能為任何位置的傳導帶能量與初始點傳導帶能量的差。假設表面復合速率(Surface Recombination Rate)無限大。

熱平衡零偏壓下，費米能階為一定值，將整體費米能階固定在初始點的費米能階位置，假設位能的初始值(Initial Guess)，將 i 由2依序帶到 $end-1$ 解出各點位能。要計算第 i 個點的 ϕ 、 E_{Fc} 、 E_{Fv} 需知其相鄰兩點 $i-1$ 、 $i+1$ 的 ϕ 、 E_{Fc} 、 E_{Fv} ，欲解第 i 個點時，第 $i-1$ 個點為本次迭代已解的值，第 $i+1$ 個點為上次迭代已解的值，如圖 2.11。



i 不為界面上的點 : 代入(2.18)(2.19)(2.20)
 i 為界面上的點 : 代入(2.21)(2.22)(2.23)

- △ 本次迭代已解的值
- 本次迭代欲解的值
- 上次迭代已解的值

圖 2.11 迭代法求解示意圖。

以下為熱平衡迭代過程:

步驟	輸入	基本方程式	輸出
1	假設位能初始值	(2.7.b), (2.7.c), (2.7.d), (2.7.e),	$n(x), p(x),$ $N_d^+, N_a^-,$
2	$n(x), p(x),$ N_d^+, N_a^-	非界面(2.18), 界面(2.21),	$\phi(x)$
3	$\phi(x)$	(2.7.b), (2.7.c), (2.7.d), (2.7.e),	$n(x), p(x),$ $N_d^+, N_a^-,$
4	重複步驟 2~3 直到 $\phi(x)$ 收斂		

以下為穩態迭代過程:

步驟	輸入	基本方程式	輸出
1	Thermal Equilibrium $\phi(x), E_{Fc}(x), E_{Fv}(x),$	(2.7.b), (2.7.c), (2.7.d), (2.7.e),	$n(x), p(x),$ $N_d^+, N_a^-,$
2	$n(x), p(x),$ N_d^+, N_a^-	非界面(2.18), 界面(2.21),	$\phi(x)$
3	$\phi(x)$	(2.7.b), (2.7.c), (2.7.d), (2.7.e),	$n(x), p(x),$ $N_d^+, N_a^-,$
4	$n(x), p(x),$ $N_d^+, N_a^-,$	(2.9.a), (2.9.b), (2.9.c),	$R_{Rad}(x), R_{Aug}(x),$ $R_{SRH}(x), G(x),$

5	$R_{\text{Rad}}(x), R_{\text{Aug}}(x), R_{\text{SRH}}(x), G(x),$	(2.19), (2.20), (2.22), (2.23),	$E_{F_c}(x), E_{F_v}(x),$
6	$\phi(x), E_{F_c}(x), E_{F_v}(x),$	(2.7.b), (2.7.c), (2.7.d), (2.7.e),	$n(x), p(x), N_d^+, N_a^-,$
7	重複步驟 2~6 直到 $\phi(x), E_{F_c}(x), E_{F_v}(x)$ 收斂		

整體的迭代流程圖如圖 2.12。

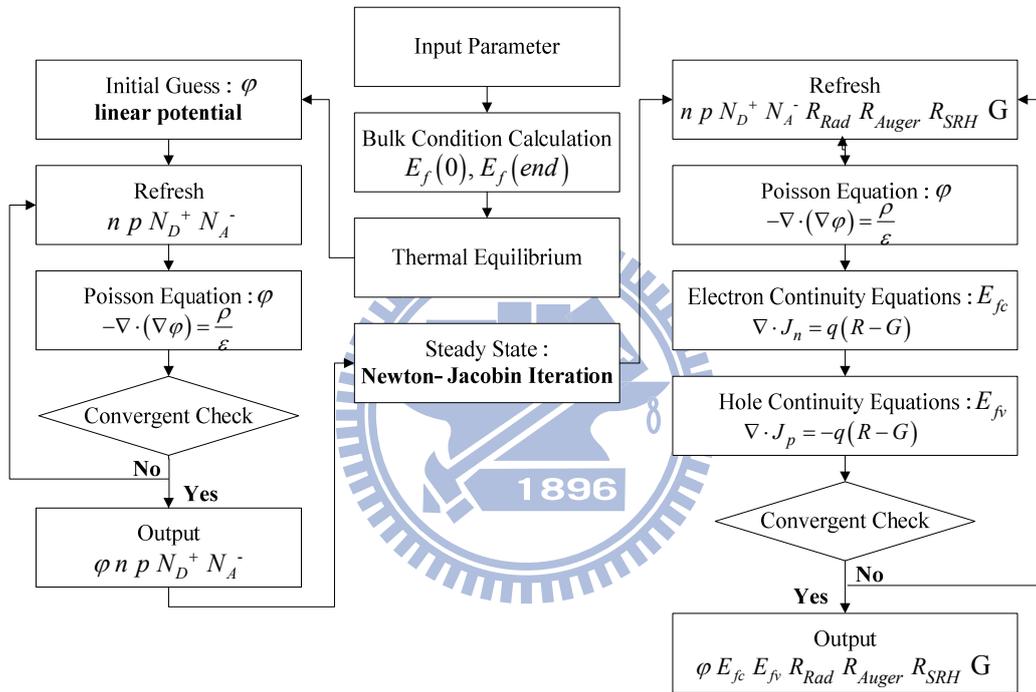


圖 2.12 Newton-Jacobi Iteration Method 流程圖。

2-2-2-2 Newton-Raphson Method

除了上述的 Newton-Jacobi Iteration Method 外，本論文使用另外一種數值方法 Newton-Raphson Method。載子所需遵守的泊松方程式、穩態電子電洞連續方程式可以整理移項改寫成 $f(x)=0$ 的形式，其中的 x 就是我們想要求得的 ϕ 、 E_{F_c} 、 E_{F_v} 。將 $f(x)$ 取泰勒展開式，則

$$f(x) = f(x_0) + \underbrace{(x - x_0)}_{\Delta x} f'(x_0) = 0, \quad (2.24)$$

$$\Delta x^{\text{initial}} = \frac{-f(x^{\text{initial}})}{f'(x^{\text{initial}})} \rightarrow x_0^{(2)} = x_0^{\text{initial}} + \Delta x^{\text{initial}} \rightarrow \text{修正 } x_0^{\text{initial}} \text{ 改成 } x_0^{(2)} \text{ 代回}$$

$$\Delta x^{(2)} = \frac{-f(x_0^{(2)})}{f'(x_0^{(2)})} \rightarrow x_0^{(3)} = x_0^{(2)} + \Delta x^{(2)} \rightarrow \text{修正 } x_0^{(2)} \text{ 改成 } x_0^{(3)} \text{ 代回}$$

$$\Delta x^{(3)} = \frac{-f(x_0^{(3)})}{f'(x_0^{(3)})} \rightarrow x_0^{(4)} = x_0^{(3)} + \Delta x^{(3)} \rightarrow \text{修正 } x_0^{(3)} \text{ 改成 } x_0^{(4)} \text{ 代回}$$

$$\vdots$$

$$\text{當 } \frac{-f(x_0^{(n)})}{f'(x_0^{(n)})} = \Delta x^{(n)} \ll 0$$

$$f(x) = f(x_0^{(n)}) = 0 \rightarrow x = x_0^{(n)} = x_0^{\text{initial}} + (\Delta x^{\text{initial}} + \Delta x^{(2)} + \Delta x^{(3)} \dots + \Delta x^{(n-1)})$$

圖 2.13 Newton-Raphson Method 以泰勒展開式求解 $f(x) = 0$ 。

以泰勒展開式求解 $f(x) = 0$ 如圖 2.13，首先需假設 x_0^{initial} ，可對應到前節所假設的位能初始值。接著代入泰勒展開式來得到修正項，

當修正到第 n 次使 $\Delta x^{(n)} = \frac{-f(x_0^{(n)})}{f'(x_0^{(n)})} \ll 0$ 時，此時 $x_0^{(n)}$ 逼近於我們想要的 x 值。

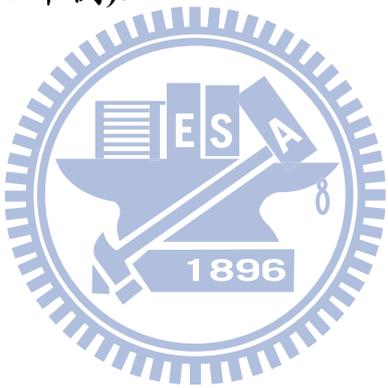
將泊松方程式、穩態電子電洞連續方程式改寫成 $f(x) = 0$ 的形式，則

$$\underbrace{-\frac{d}{dx} \varepsilon_r(x) \frac{d}{dx} \phi(x) - \frac{q [p(x) - n(x) + N_a^+(x) - N_a^-(x)]}{\varepsilon_0}}_{f(\phi)} = 0, \quad (2.25)$$

$$\underbrace{\frac{d\mathbf{J}_n(x)}{dx} - q[R(x) - G(x)]}_{f(E_{fc})} = 0, \quad (2.26)$$

$$\underbrace{\frac{d\mathbf{J}_p(x)}{dx} + q[R(x) - G(x)]}_{f(E_{fv})} = 0, \quad (2.27)$$

為了求解 Δx 我們必須處理 $f'(x_0)$ 的反矩陣，如果處理不慎容易導致程式發散。 $f'(x_0)$ 及 $f(x_0)$ 矩陣的維度取決於切割點的數目，將 $f(\phi)=0$ 、 $f(E_{Fc})=0$ 、 $f(E_{Fv})=0$ 合併處理，則 $f'(x_0)$ 及 $f(x_0)$ 可表示如下(以切割點數目 $n=2$ 舉例):

$$-f(x_0) = \begin{bmatrix} -f(\phi_1) \\ -f(\phi_2) \\ -f(E_{Fc}^1) \\ -f(E_{Fc}^2) \\ -f(E_{Fv}^1) \\ -f(E_{Fv}^2) \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$


$$f'(x_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\phi_1)}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f(\phi_2)}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f(E_{Fc}^1)}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f(E_{Fc}^2)}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f(E_{Fv}^1)}{\partial \phi_1} & \frac{\partial f(E_{Fv}^2)}{\partial \phi_1} \\ \frac{\partial f(\phi_1)}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f(\phi_2)}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f(E_{Fc}^1)}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f(E_{Fc}^2)}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f(E_{Fv}^1)}{\partial \phi_2} & \frac{\partial f(E_{Fv}^2)}{\partial \phi_2} \\ \frac{\partial f(\phi_1)}{\partial E_{Fc}^1} & \frac{\partial f(\phi_2)}{\partial E_{Fc}^1} & \frac{\partial f(E_{Fc}^1)}{\partial E_{Fc}^1} & \frac{\partial f(E_{Fc}^2)}{\partial E_{Fc}^1} & \frac{\partial f(E_{Fv}^1)}{\partial E_{Fc}^1} & \frac{\partial f(E_{Fv}^2)}{\partial E_{Fc}^1} \\ \frac{\partial f(\phi_1)}{\partial E_{Fc}^2} & \frac{\partial f(\phi_2)}{\partial E_{Fc}^2} & \frac{\partial f(E_{Fc}^1)}{\partial E_{Fc}^2} & \frac{\partial f(E_{Fc}^2)}{\partial E_{Fc}^2} & \frac{\partial f(E_{Fv}^1)}{\partial E_{Fc}^2} & \frac{\partial f(E_{Fv}^2)}{\partial E_{Fc}^2} \\ \frac{\partial f(\phi_1)}{\partial E_{Fv}^1} & \frac{\partial f(\phi_2)}{\partial E_{Fv}^1} & \frac{\partial f(E_{Fc}^1)}{\partial E_{Fv}^1} & \frac{\partial f(E_{Fc}^2)}{\partial E_{Fv}^1} & \frac{\partial f(E_{Fv}^1)}{\partial E_{Fv}^1} & \frac{\partial f(E_{Fv}^2)}{\partial E_{Fv}^1} \\ \frac{\partial f(\phi_1)}{\partial E_{Fv}^2} & \frac{\partial f(\phi_2)}{\partial E_{Fv}^2} & \frac{\partial f(E_{Fc}^1)}{\partial E_{Fv}^2} & \frac{\partial f(E_{Fc}^2)}{\partial E_{Fv}^2} & \frac{\partial f(E_{Fv}^1)}{\partial E_{Fv}^2} & \frac{\partial f(E_{Fv}^2)}{\partial E_{Fv}^2} \end{bmatrix}, \quad (2.29)$$

Newton-Jacobin Iteration Method 及 Newton-Raphson Method 兩

種數值方法優缺點的比較如表 2.1

	Newton-Jacobin Iteration Method	Newton-Raphson Method
收斂性	收斂性較佳且可允許的外加偏壓改變量較大。	收斂性較差且可允許的外加偏壓改變量較小。
時間	非常久 (~幾百萬個 loop)	非常快 (~幾十個 loop)
備註	1、需將方程式整理成(2.24)~(2.26)的形式。 2、切割點數目沒有限制，唯獨點數過多程式運算相當耗時。	1、僅需將欲求的方程式移項整理成 $f(x)=0$ 的形式。 2、當切割點太多，矩陣維度會超過程式所能運算的最大限制。 3、反矩陣處理不佳容易發散。

表 2.1 Newton-Jacobin Iteration Method 與 Newton-Raphson Method 方法比較。

2-3 蒙地卡羅光跡追蹤法

當光子在主動層發光後其在元件內部的行為就被追蹤直到逃脫元件或是被吸收。本論文利用蒙地卡羅光跡追蹤法 [25]，除了藉此計算發光二極體的外部量子效率外，當考慮光子循環效應下也可以計算穩態電子電洞連續方程式中主動層的載子產生速率。

光子在元件內部傳播編號為 $P=1$ ，也就是光子是活著的，當光子被主動層、接觸層、金屬電極或逃脫元件時編號為 $P=0$ 。

$$\begin{cases} P=1 & (\text{photon alive}) \\ P=0 & (\text{photon absorbed}) \end{cases}, \quad (2.30)$$

電性上的輻射復合速率會決定電子電洞對在主動層各點復合的機率，意即光子產生的位置必須考慮電性上輻射復合速率的影響。此外一旦光子在主動層產生，其傳播方向是各向均勻的，我們必須藉由均勻亂數的方式來決定初始傳播角度 θ 、 ϕ 。

$$v = \frac{c}{n} \left(\sin\theta \cos\phi \hat{x} + \sin\theta \sin\phi \hat{y} + \cos\theta \hat{z} \right), \quad (2.31)$$

其中 c 是真空中光速， v 是介質中光速， n 為介質折射率。

假設初始發光位置為 (x_0, y_0, z_0) ，當光傳播碰到元件的邊界或材料之間界面時，位置為 (x_2, y_2, z_2) ，所經過的路徑長 l ，對應到材料吸收機率為 A_p ，並且以亂數 ρ_p 來決定此光子是否會被材料吸收，其中 α_p 代表各層材料的吸收係數。

$$\ell = \sqrt{(x_2 - x_0)^2 + (y_2 - y_0)^2 + (z_2 - z_0)^2}, \quad (2.32)$$

$$A_p = \exp(-\alpha_p \ell), \quad (2.33)$$

$$\begin{cases} P=1, & \rho_p \leq A_p \quad (\text{photon alive}) \\ P=0, & \rho_p > A_p \quad (\text{photon absorbed}) \end{cases}, \quad (2.34)$$

當考慮光子循環效應時，必須知道光子被主動層吸收產生電子電洞對的確切位置，藉此得到載子產生速率的分佈。將主動層的路徑 ℓ 分割成更細小的路徑 $d\ell$ ，主動層的吸收機率也改寫成 $A_p = \exp(-\alpha_p d\ell)$ ，如此一來極短路徑的改變量可以知道光子被主動層吸收的確切位置 [36]。

光子傳播到材料界面時由菲涅爾方程式來考慮反射與穿透，唯獨在 n-type GaAs 接觸層與其金屬電極界面時需由 2-1 節中光性處理技巧來計算反射率與穿透率。光子反覆在材料間傳播直到逃脫元件或被吸收才會停止整個追蹤過程。蒙地卡羅光跡追蹤法以亂數為判定技巧，輻射的光子數目也必須足夠多使亂數的選取與真實的分佈吻合。光跡追蹤流程如圖 2-14。

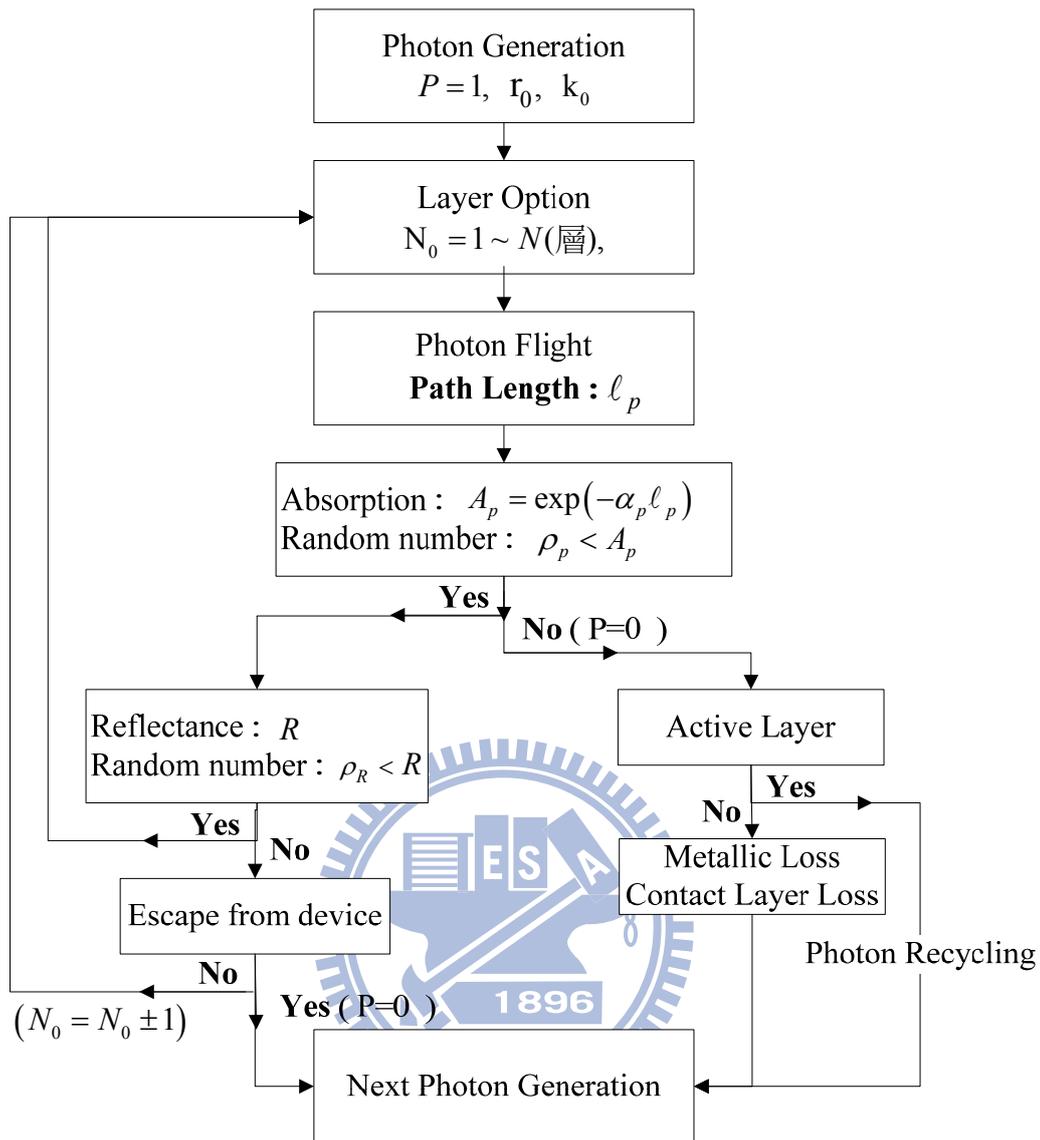


圖 2-14 蒙地卡羅光跡追蹤模擬流程圖。

2-4 光性、電性與蒙地卡羅的結合

前面三節提到本論文利用光性、電性及蒙地卡羅程式的互相結合來模擬發光二極體元件。首先必須建立光性的資料庫，如同 2-1 節中所提到不同入射角所對應的反射率、穿透率及金屬損耗資料，同時也必須建立金屬孔洞電極的散射角資料庫。在電性上主動層不同位置的載子產生速率必須藉由蒙地卡羅光跡追蹤法獲得，然而在使用蒙地卡

羅光跡追蹤法時也需藉由電性所提供的輻射復合速率來決定主動層的發光分佈。因此程式彼此之間互相耦合，直到整個系統達到穩態收斂。其中元件的外部量子效率是我們最在意的參數。流程如圖 2-15。

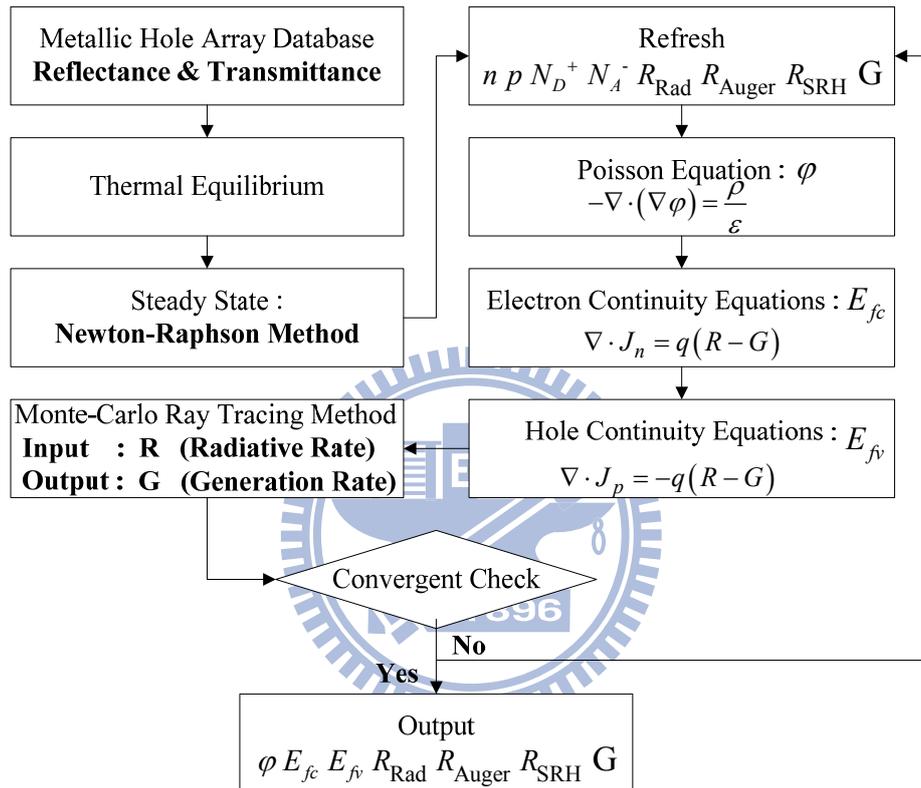


圖 2-15 光性、電性與蒙地卡羅結合流程圖。

第三章 結果與討論

3-1 模擬假設與參數

本論文中為了簡化模擬 LED 結構的複雜度，我們做了一些合理的假設如下。

- (1) 金屬孔洞電極的波性會隨著入射光的頻率而改變，主動層自發性放射(Spontaneous Emission)為頻譜的形式，如果以頻譜方式呈現會使整個系統的計算量相當龐大。自發性放射頻譜的半高寬約 $3k_B T$ ，我們發現在半高寬頻率範圍內金屬孔洞電極的穿透率並沒有很大的變化如圖 3.1。因此計算中假設主動層發出平均光子能量約 $E_g + 3k_B T/2$ 的單頻光且輻射復合速率表示成 $B(np - n_i^2)$ 的形式。

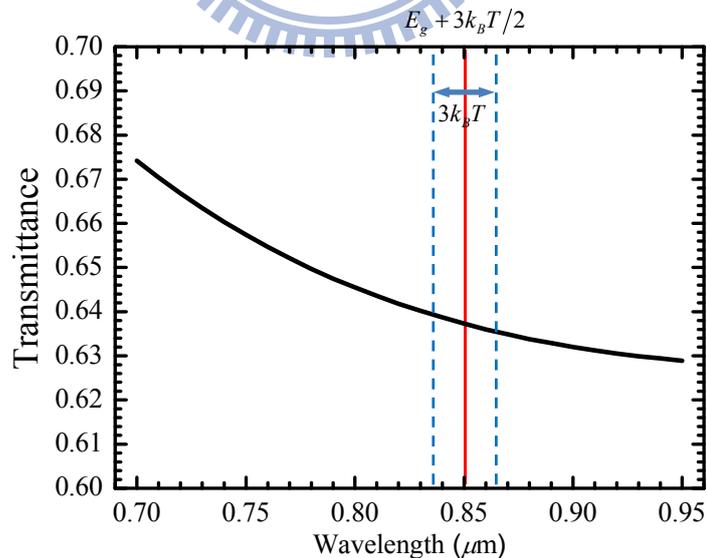


圖 3.1 金屬孔洞電極以不同波長入射所對應穿透率。在半高寬範圍內($3k_B T$)穿透率沒有明顯的變化。

- (2) 文獻[37]中得知對應於發光波長 $\lambda=0.85\mu\text{m}$ 及折射率 $n=3.6$ 的條件下，當元件腔體的總厚度小於 $L_{\text{cavity}}=n\lambda=3.6\times 0.85\mu\text{m}=3.06\mu\text{m}$ 時需考慮共振效應。模擬中沒有考慮到共振效應，因此為了避開此效應我們將 n 型與 p 型 AlGaAs 披覆層的厚度各別控制在 $2\mu\text{m}$ 使整個元件的總厚度大於 L_{cavity} 。
- (3) 蒙地卡羅計算中各層材料折射率與吸收係數會隨著載子濃度以及發光波長而改變。即使可以藉由電性了解元件中各點的載子濃度，但為了減少整個程式的運算量假設折射率與吸收係數為定值。
- (4) 主動層輻射復合發光假設在元件內部傳播是沿著波向量的方向且視為粒子性，因此在材料界面之間反射與穿透行為由菲涅爾方程式決定，唯獨 n-GaAs 接觸層與金屬孔洞電極界面需解波方程。
- (5) 電性模擬上假設 $2\mu\text{m}$ 厚度的 n -type AlGaAs 可以提供很好的電流擴散分佈，因此 x - y 平面上的發光是均勻分佈的，而 z 方向的發光位置由各點輻射復合速率的大小來決定。
- (6) 模擬中施加的電壓是直接跨在元件上，外部電阻所造成的電壓降無法考慮。
- (7) 假設元件內部產生的熱可以迅速藉由薄膜金屬反射層帶走，模擬的元件溫度設為定值 300K 。

Parameter	Symbol	Value	Unit
Al_xGa_{1-x}As			
Refractive index	n	$3.3-0.53x+0.09x^2$	
Permittivity	ϵ_r	12.9-2.84x	
SRH lifetime	τ_n, τ_p	$1 \times 10^{-8}, 1 \times 10^{-8}$	s
Effective electron mass	m_c	$(0.063+0.083x) m_0$	
Effective heavy hole mass	m_{hh}	$(0.51+0.25x) m_0$	
Effective light hole mass	m_{lh}	$(0.082+0.068x) m_0$	
Richardson constant	A	120	$A/cm^2 K^2$
Effective Richardson constant	A_n	$A m_c/m_0$	$A/cm^2 K^2$
Effective Richardson constant	A_p	$A(m_{hh}+m_{lh})/m_0$	$A/cm^2 K^2$
Band gap energy	E_g	$1.519+1.155x+0.37x^2-5.405 \times 10^{-4} T^2/(T+204)$	eV
Effective Density of state	N_c	$4.82 \times 10^{15} T^{1.5} (m_c/m_0)^{1.5}$	cm^{-3}
Effective Density of state	N_v	$4.82 \times 10^{15} T^{3/2} ((m_{hh}/m_0)^{1.5} + (m_{lh}/m_0)^{1.5})$	cm^{-3}
Mobility	μ_n	$(8 \times 10^3 - 2.2 \times 10^4 x + 10^4 x^2) \times (T/300)^{-10 \times /3-1}$	$cm^2 V^{-1} s^{-1}$
Mobility	μ_p	$(370-970x+740x^2) \times (T/300)^{-7 \times /3-2.3}$	$cm^2 V^{-1} s^{-1}$
GaAs			
Refractive index	n	3.3	
Absorption coefficient	α	5×10^3	cm^{-1}
Permittivity	ϵ_r	12.9	
SRH lifetime	τ_n, τ_p	$1.3 \times 10^{-6}, 1.2 \times 10^{-6}$	s
Bimolecular recombination coefficient	B	$3 \times 10^{-10} \times (300/T) \times (E_g/1.5eV)^2$	$cm^3 s^{-1}$
Auger coefficient	C_n, C_p	$1 \times 10^{-31}, 1.2 \times 10^{-30}$	$cm^6 s^{-1}$
Effective electron mass	m_c	$0.063 m_0$	
Effective heavy hole mass	m_{hh}	$0.51 m_0$	
Effective light hole mass	m_{lh}	$0.082 m_0$	
Richardson constant	A	120	$A/cm^2 K^2$
Effective Richardson constant	A_n	$A m_c/m_0$	$A/cm^2 K^2$
Effective Richardson constant	A_p	$A(m_{hh}+m_{lh})/m_0$	$A/cm^2 K^2$
Band gap energy	E_g	$1.519-5.405 \times 10^{-4} T^2/(T+204)$	eV
Effective Density of state	N_c	4.7×10^{17}	cm^{-3}
Effective Density of state	N_v	9×10^{18}	cm^{-3}
Mobility	μ_n	$8000 \times (T/300)^{-1}$	$cm^2 V^{-1} s^{-1}$
Mobility	μ_p	$370 \times (T/300)^{-2.3}$	$cm^2 V^{-1} s^{-1}$
Parameter			
Intrinsic carrier concentration	n_i	$(N_c N_v)^{0.5} e^{-E_g/2kT}$	cm^{-3}
Vacuum permittivity	ϵ_0	$8.854187e-14$	F/cm
Band offset	ΔE_c	$0.6 \Delta E_g$	eV
Band offset	ΔE_v	$0.4 \Delta E_g$	eV
Degeneracy factor	g_d	2	
Degeneracy factor	g_a	4	
Ionization energy	E_d	$E_c - kT$	eV
Ionization energy	E_a	$E_v + kT$	eV

表 3.1 AlGaAs 及 GaAs 材料參數。

3-2 金屬孔洞電極提升外部量子效率的機制

為了分析金屬孔洞電極提升外部量子效率的機制，藉由入射各種角度的光於金屬孔洞電極上如圖 3.2，觀察不同入射角對應的穿透率 T 、反射率 R 及金屬損耗 L 。傳統平面式結構其 GaAs/空氣界面在 $\theta=16^\circ$ 發生全反射如圖 3.3(a)。然而當入射金屬孔洞電極時發現入射角大於臨界角卻有微量的穿透率如圖 3.3(b)，原因是大角度的入射光藉由激發金屬表面態(Surface States)所造成的共振穿透 [38]。光子由 GaAs 接觸層穿透至空氣層需滿足 z 軸波向量 $k_z > 0$ ，由(3.1)式知需滿足 $\omega > \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} k_{\parallel}$ 。其中 $\epsilon_{I,III}$ 為區域一及區域三介電常數， c 為真空光速。藉由色散關係(Dispersion Relation)可說明穿透率發生位置的水平波向量與入射角關係如圖 3.4。

$$k_z = \sqrt{\epsilon_{I,III} \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - k_{\parallel}^2}, \quad (3.1)$$

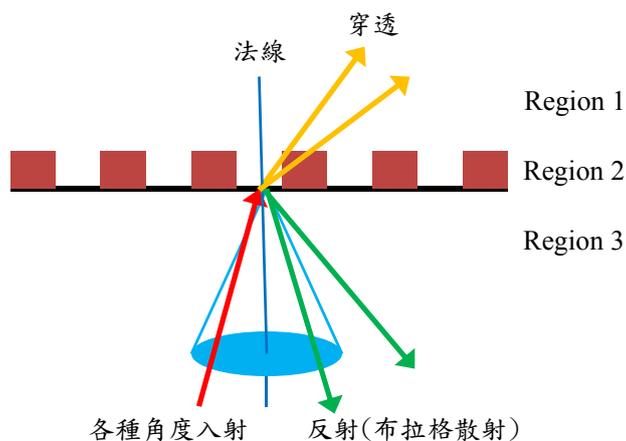


圖 3.2 入射各種角度的光於金屬孔洞電極，布拉格散射導致不同模態折射角與反射角，加總為穿透率 T 與反射率 R ，其中金屬損耗 $L=1-(T+R)$ 。

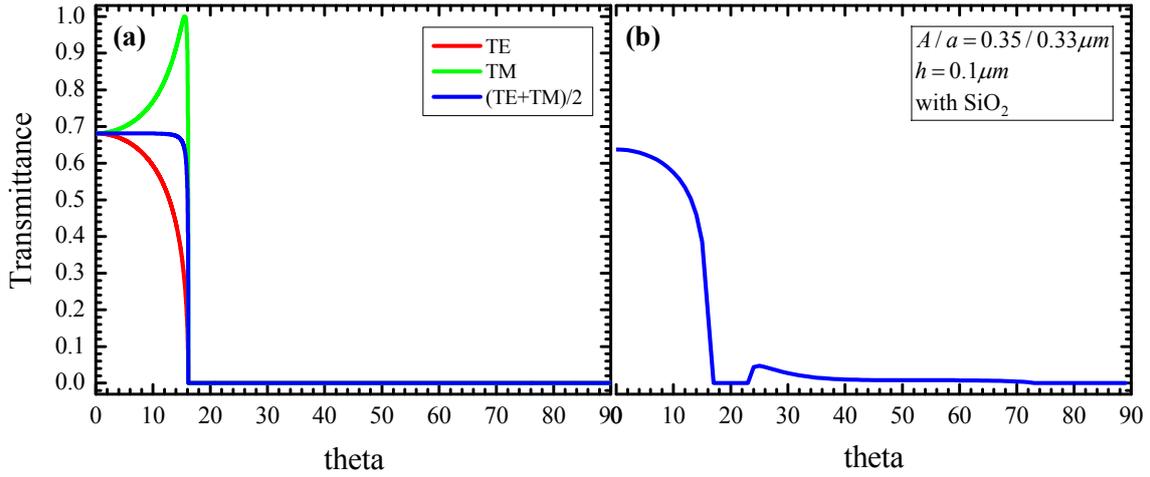


圖 3.3 入射光在 $\phi = 0^\circ$ 、不同 θ 角所對應的穿透率。(a) 為 GaAs/空氣界面 (b) 為金屬孔洞電極。可以發現(b)當入射角大於臨界角仍有微量穿透率。

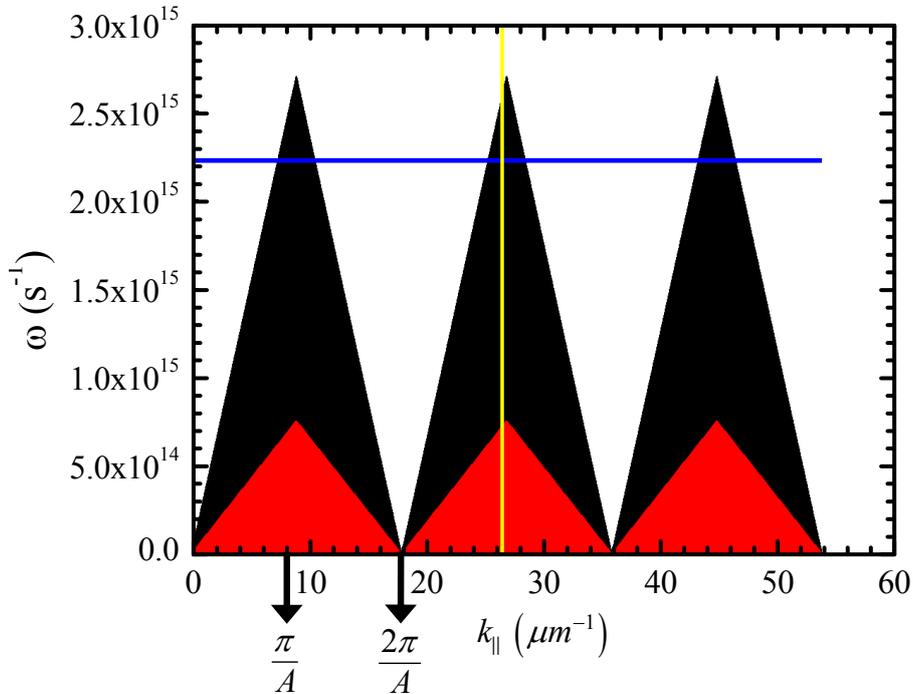


圖 3.4 金屬孔洞電極之光子色散關係 $\omega - k_{\parallel}$

入射光由 GaAs 接觸層射向金屬孔洞電極，圖 3.4 黑色區域以外為空氣光錐(Light Cone)；紅色區域以外為 GaAs 接觸層光錐；藍色線為入射光波長 $\lambda = 0.85 \mu\text{m}$ 所對應的頻率；黃色線為 $\phi = 0^\circ$ 、 $\theta = 90^\circ$

對應的 k_{\parallel} 。GaAs 與空氣光錐交集的白色區域才允許有穿透率，對應到 k_{\parallel} 可解釋圖 3.3(b) 穿透所對應的入射角。

金屬孔洞電極提供的布拉格散射將會使得原先大於臨界角的入射光有機會散射使反射角小於臨界角，藉由臨界角內高穿透率的特性來提升光萃取效率。本論文中定義散射機率 $\gamma = \gamma_1 - \gamma_2$ ，其中 γ_1 為大於臨界角的入射光散射進入臨界角內的機率， γ_2 為小於臨界角的入射光散射跑出臨界角外的機率。由此可知 γ 值越大其金屬孔洞電極對於光萃取效率的提升越有幫助。

3-3 主動層摻雜

當主動層高濃度 p 型或 n 型摻雜，在靠近披覆層的區域因為空乏區較小而有較大的電場，載子容易流出主動層外導致輻射復合速率下降。高濃度摻雜也會形成複合中心(Recombination Center)，計算中沒有考慮與高濃度摻雜有關的非輻射復合機制。此外 p 型摻雜又比 n 型摻雜好，原因在於電子具有較大的遷移率，使得 p 型摻雜的少數載子(電子)有較長的擴散長度(Diffusion Length)，主動層內載子的分佈較均勻。我們對(1.1)式取微分藉此得到最佳外部量子效率下的主動層 p 型摻雜濃度為 $N_a = 1/\sqrt{\tau_n C_p} = 8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 。其中 τ_n 為電子 SRH 生命期， C_p 為電洞 Auger 復合係數 [39]。

3-4 主動層厚度分析

由(1.1)式說明發光二極體元件的外部量子效率受到載子注入效率、內部量子效率、光子循環效率及光萃取效率的影響。圖 3.5(a)為金屬孔洞電極內部填充 SiO_2 、 $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 、 $h=0.1\mu\text{m}$ 、主動層厚度 100nm 條件下的模擬結果。對於 AlGaAs/GaAs/AlGaAs 材料當元件偏壓 1.36V ，高能障的 $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ 披覆層使得載子注入效率接近 100%以及高磊晶品質使得內部量子效率接近 100%。因此外部量子效率的提升主要受光子循環效率與光萃取效率影響。

圖 3.5(a)發現外部量子效率在外加偏壓 1V 時劇烈提升，原因是載子復合速率隨著偏壓升高從低偏壓的 SRH 主導變成輻射復合主導，造成內部量子效率在 1V 時劇烈提升，然而當外加更高偏壓時 Auger 復合提高使得內部量子效率開始下降如圖 3.5(b)。元件內部假如沒有任何損耗機制時，經過多次全反射後全部光子都會逃脫元件。就提升外部量子效率的觀點來看最好不要有任何吸收損耗機制，即使被吸收也最好是主動層吸收而重新輻射光子。

圖 3.6 發現隨著主動層厚度增加($25\text{nm}\rightarrow 1500\text{nm}$)外部量子效率隨之遞增。由於此金屬電極結構的光萃取效率低於 10%，光子不易逃脫元件使得內部全反射過程中容易被吸收損失，因此藉由主動層厚度的增加來增加光子被主動層吸收的機率，進而提升光子循環效率。然

而當厚度(1500nm→2500nm)時主動層吸收太強烈使得光子無法到達邊界逃脫元件，雖然光子循環效率大幅提升接近 100%卻也使得光萃取效率過低，導致外部量子效率開始下降。在金屬孔洞電極內部填充 SiO_2 、 $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 、 $h=0.1\mu\text{m}$ 的條件下主動層厚度在 $1.5\mu\text{m}$ 有最大的外部量子效率。

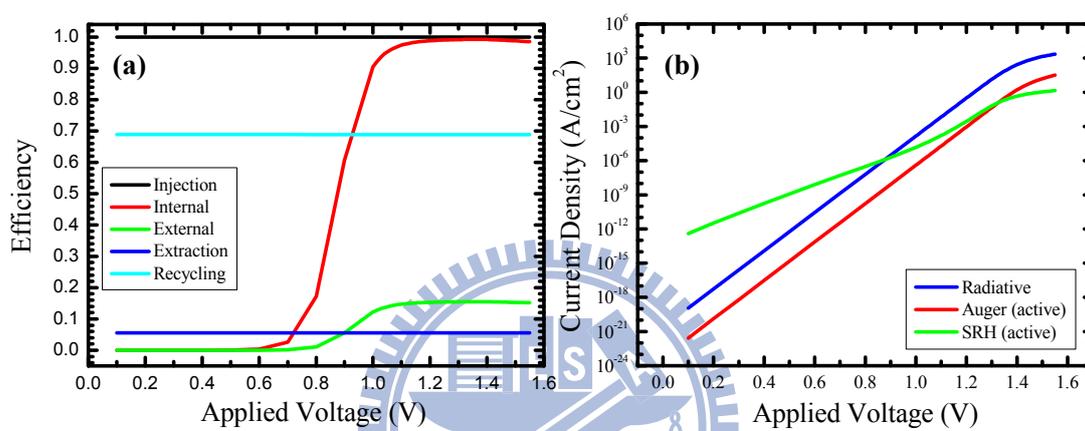


圖 3.5 金屬孔洞電極內部填充 SiO_2 、 $A/a=0.35/0.33\mu\text{m}$ 、 $h=0.1\mu\text{m}$ 、主動層厚度 100nm 條件下的模擬結果。(a) 不同偏壓下的載子注入效率、內部量子效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。(b) 不同偏壓下的輻射復合電流密度及非輻射復合電流密度。

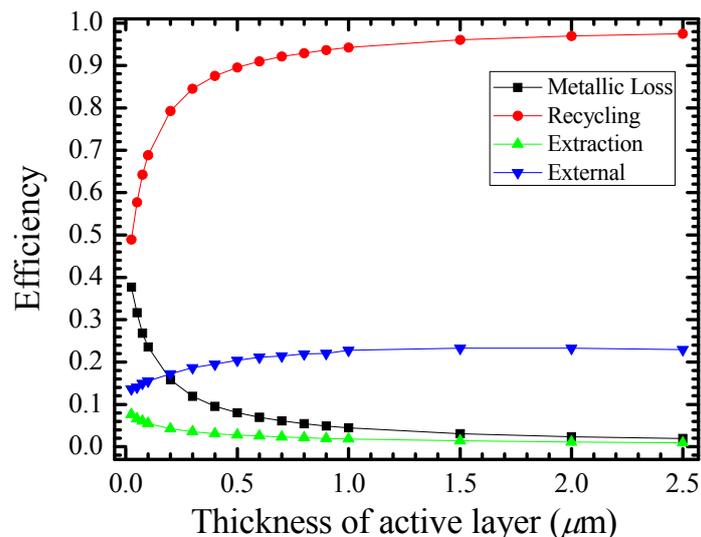


圖 3.6 不同主動層厚度下的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。主動層厚度在 $1.5\mu\text{m}$ 有最大的外部量子效率。

3-5 金屬孔洞內填充 SiO₂ 的影響

以各種角度入射填充 SiO₂ 後的金屬孔洞所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率如表 3.2，模擬結果如圖 3.7。金屬孔洞內部填充 SiO₂ 可以提升散射機率 γ 值及藉由傳播模態(Propagation Mode)提升穿透率。若將金屬孔洞視為單一波導來看則孔洞填充 SiO₂ 會有傳播模態的存在使得穿透率大於沒有填充的情形如表 3.2，同時也會增加金屬損耗使得填充後外部量子效率只增加 1.5%。觀察金屬孔洞電極與 GaAs 接觸層之間的表面態(Surface States)可以發現填充 SiO₂ 後其表面態的近場在孔洞內分佈較不均勻且較多電場分佈在金屬區域導致較高金屬損耗如圖 3.8。

	Transmittance (%)	Reflectance (%)	Loss (%)	γ (%)
air	1.6966	96.1238	2.1796	0.050559799
oxide	2.356	94.3476	3.2964	0.132064833

表 3.2 以各種角度入射填充 SiO₂ 後的金屬孔洞電極，所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率。

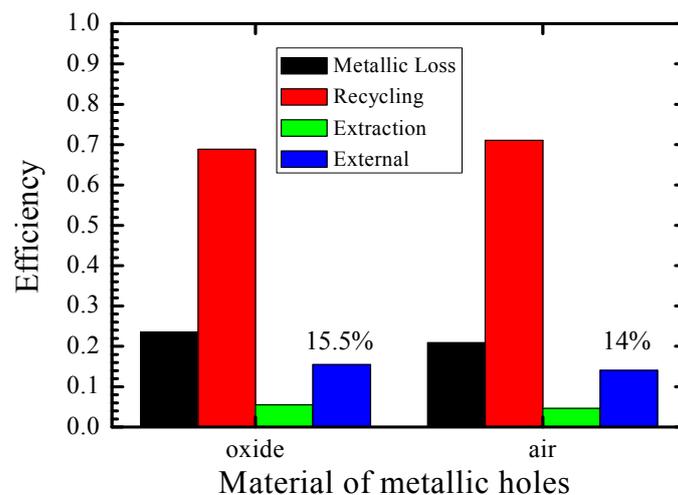


圖 3.7 模擬結果。 $A/a = 0.35/0.33\mu\text{m}$ 、 $h = 0.1\mu\text{m}$ 的金屬孔洞電極填充與不填充 SiO₂ 的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。填充 SiO₂ 後外部量子效率由 14% 增加至 15.5%。

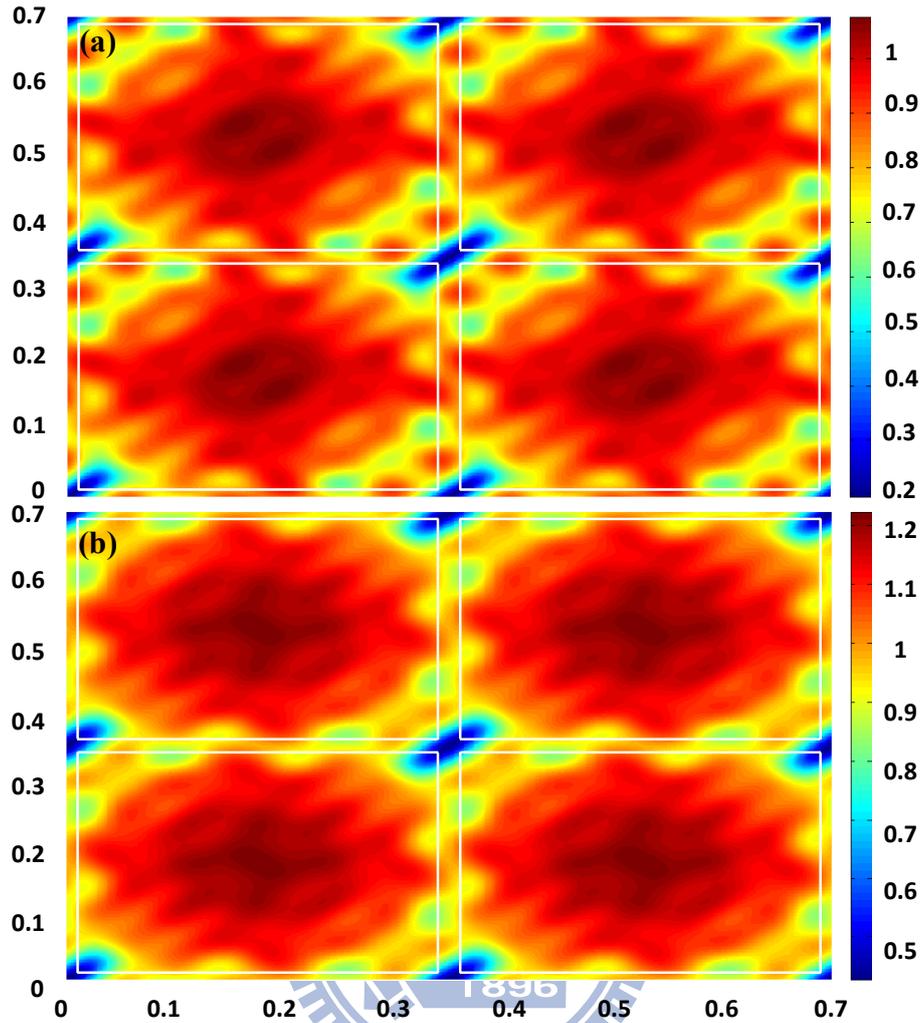


圖 3.8 表面態近場分佈。(a)孔洞填充SiO₂ (b)孔洞沒有填充SiO₂。

3-6 週期與孔洞長度 A/a 分析

首先計算三種不同平面式結構的外部量子效率如圖 3.9。圖 3.9(a) n -type GaAs 接觸層上方有直徑 $100\mu m$ 的圓形電極；圖 3.9(b)與(a)類似但沒有圓形電極；圖 3.9(c)與(b)類似但 n -type GaAs 接觸層與空氣之間有一層 SiO₂。三種結構外部量子效率分別是 13.254%、14.576% 及 15.415%。SiO₂ 的折射率約 1.45，對於結構(c)與(b)相比 GaAs 接觸層與空氣之間為漸進的折射率因此結構(c)有較佳的外部量子效率。

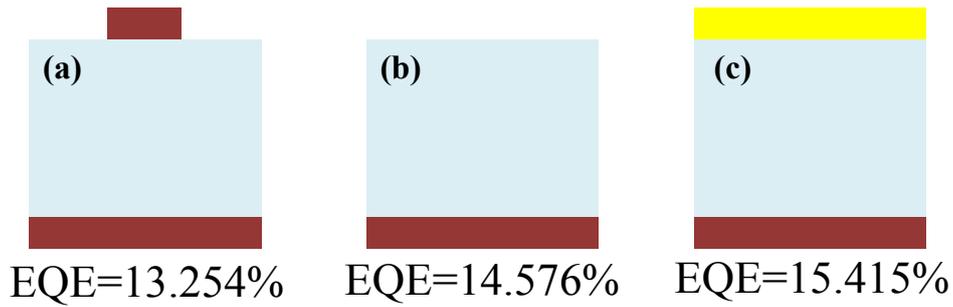


圖 3.9 模擬三種不同平面式結構。(a)有直徑 $100\mu\text{m}$ 圓形電極 (b)沒有圓形電極 (c)GaAs 接觸層與空氣界面有 SiO_2 。

固定週期長度 $A=0.35\mu\text{m}$ 、孔洞填充 SiO_2 、 $h=0.1\mu\text{m}$ ，不同 a 的金屬孔洞電極以各種角度入射所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率如表 3.3，模擬結果如圖 3.10。穿透率是所有入射角平均過後的結果，然而小角度與大角度入射造成的穿透是不一樣的物理機制，無法用一個簡單物理圖像來分析此平均過後穿透率變化的趨勢，但隨著孔洞面積變大而有較高穿透率是符合預期的。當 a 越小則金屬損耗越大，觀察金屬孔洞電極與 GaAs 接觸層之間的面態(Surface States)可以發現隨著 a 的縮小表面態電場大多分佈在金屬區域如圖 3.11。

表 3.3 隨著 a 變大穿透率增加且金屬損耗下降，對於增加外部量子效率是有幫助的，然而散射機率也會隨之下降使得 $a=0.33\mu\text{m}$ 時 EQE 有最大值 15.512%。因此當孔洞長度 a 接近於週期長度 A 的情形下($a=0.349\mu\text{m}$)，外部量子效率會下降到接近平面式結構圖 3.9(c) 的情形。

比較 $A/a=0.35/0.33 \mu\text{m}$ 的金屬孔洞電極與 $A/a=0.35/0.349 \mu\text{m}$ 的極端情形發現 $A/a=0.35/0.349 \mu\text{m}$ 具有高穿透率及低金屬損耗，理當具有較高的外部量子效率，然而根據表 3.4 發現 $A/a=0.35/0.33 \mu\text{m}$ 的金屬孔洞電極具有較高的外部量子效率，原因是布拉格散射發揮作用導致光萃取效率大量提升，即使因為金屬損耗導致光子循環效率下降，整體外部量子效率仍大幅增加。對於 $a \leq 0.31 \mu\text{m}$ 布拉格散射所提升的光萃取效率比不上金屬損耗導致的光子循環效率下降，使其外部量子效率 (EQE=12.601%) 比平面式結構 (EQE=13.254%) 低。由此可知在週期固定下適當控制孔洞長度才能使外部量子效率有所提升。

A/a (μm)	Transmittance (%)	Reflectance (%)	Loss (%)	γ (%)
0.35/0.27	1.3838	77.1844	21.4318	1.257248874
0.35/0.28	1.4814	77.7506	20.768	1.333751765
0.35/0.29	1.6036	78.2308	20.1656	0.824227798
0.35/0.3	1.9148	87.523	10.5622	0.372016499
0.35/0.31	2.0242	90.3122	7.6636	0.240277615
0.35/0.32	2.2202	93.2322	4.5476	0.168825792
0.35/0.33	2.356	94.3476	3.2964	0.132064833
0.35/0.349	3.0802	96.5336	0.3862	0.007458543

表 3.3 以各種角度入射不同孔洞長度 a 的金屬孔洞電極所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率。

a (μm)	0.27	0.28	0.29	0.3	0.31	0.32	0.33	0.349
EQE (%)	6.707	7.535	7.716	11.56	12.601	15.175	15.512	15.415

表 3.4 固定週期 $A=0.35 \mu\text{m}$ ，不同孔洞長度 a 所對應的外部量子效率。

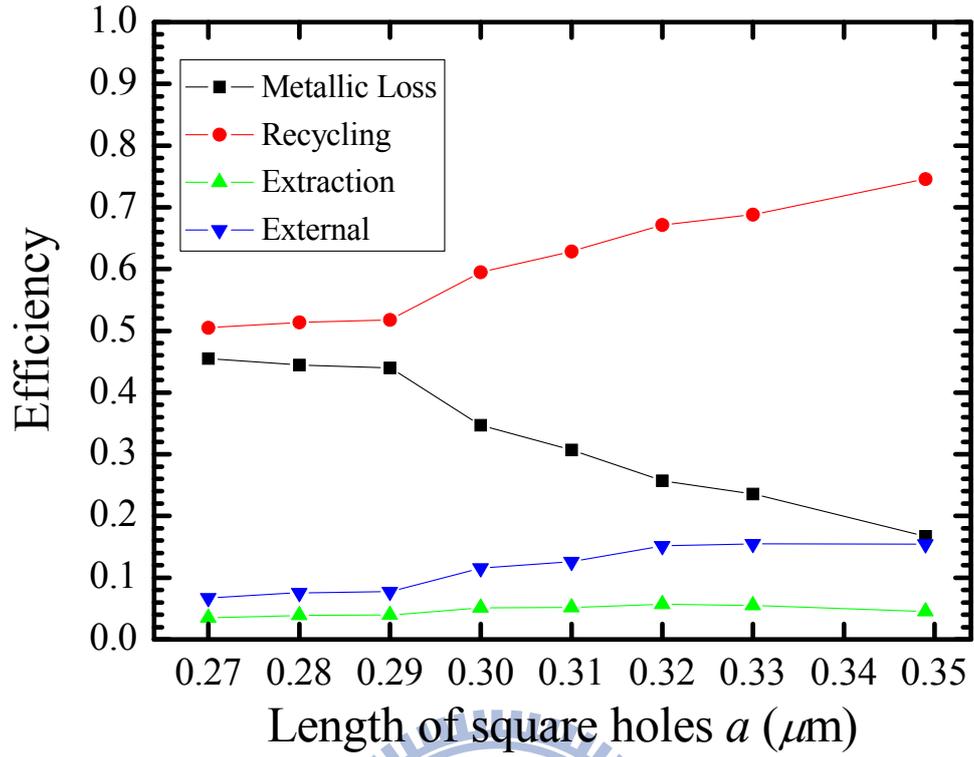


圖 3.10 模擬結果。不同孔洞長度 a 的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。元件設計不良如 $a \leq 0.31 \mu\text{m}$ (EQE=12.601%) 會使其外部量子效率比平面式結構 (EQE=13.254%) 低。

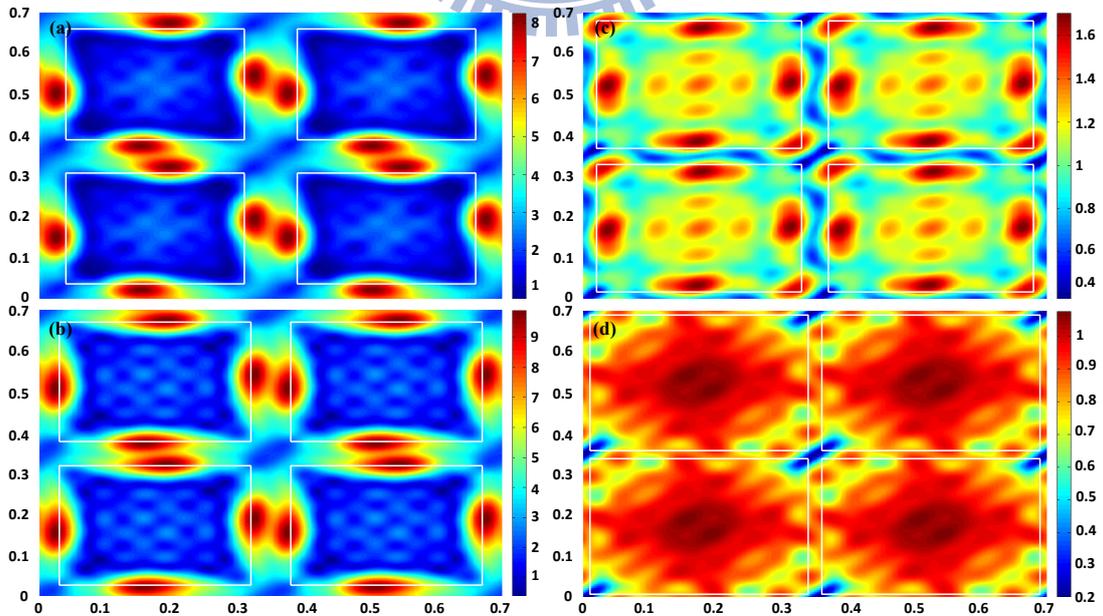


圖 3.11 表面態近場分佈。(a) $a=0.27$ (b) $a=0.29$ (c) $a=0.31$ (d) $a=0.33 \mu\text{m}$ 。

3-7 金屬孔洞電極厚度分析

$A/a=0.35/0.33 \mu\text{m}$ 、填充 SiO_2 後的金屬孔洞電極以不同角度 $\theta=0\sim 16^\circ$ 入射，觀察不同厚度下的穿透率發現有法布里-珀羅 (Fabry-Perot) 干涉現象如圖 3.12(b)。垂直入射峰值發生位置在 $h=0.22\mu\text{m}$ 、 $h=0.6\mu\text{m}$ 及 $h=0.98\mu\text{m}$ ，由於孔洞週期特性無法以金屬波導的概念去正確擬合峰值位置。圖 3.11(a) 不同厚度下外部量子效率的變化趨勢與 (b) 穿透率曲線趨勢吻合且金屬損耗會隨著厚度增加而提升。

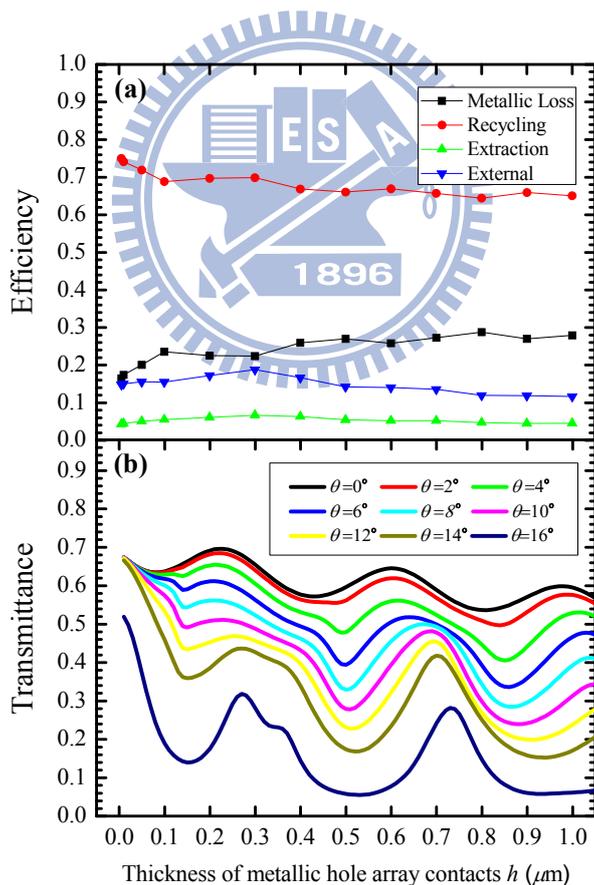


圖 3.12(a) $A/a=0.35/0.33 \mu\text{m}$ 、孔洞填充 SiO_2 ，改變不同金屬電極厚度的模擬結果。(b) 改變入射光 $\theta=0\sim 16^\circ$ ，觀察不同金屬孔洞電極厚度下的穿透率，垂直入射下在厚度 $h=0.22\mu\text{m}$ 、 $h=0.6\mu\text{m}$ 及 $h=0.98\mu\text{m}$ 發現有 Fabry-Perot 干涉現象。

模擬結果發現金屬孔洞電極越薄 $h = 0.005 \mu m$ (EQE=14.792%) 必須回到圖 3.9(a) 平面式結構 (EQE=14.576%) 的情形。隨著電極厚度 h 增加，雖然散射機率 γ 值也增加但穿透率下降與金屬損耗增加使得在 $h = 0.3 \mu m$ 附近外部量子效率有最大值 (EQE=18.796%)，其厚度位於第一階 Fabry-Perot 建設性干涉附近。

此外我們也藉由改變孔洞長度 a 觀察是否也會有 Fabry-Perot 現象發生如圖 3.13。圖 3.13(a~d) 分別是 $a = 0.27, 0.29, 0.31, 0.33 \mu m$ 的結果，對應第一階 Fabry-Perot 的厚度為 $h = 0.39, 0.34, 0.3, 0.22 \mu m$ 。可以發現不同孔洞長度也會有 Fabry-Perot 建設性干涉現象且當孔洞長度縮小時需要比較大的金屬電極厚度 h 才能達到第一階 Fabry-Perot 建設性干涉。



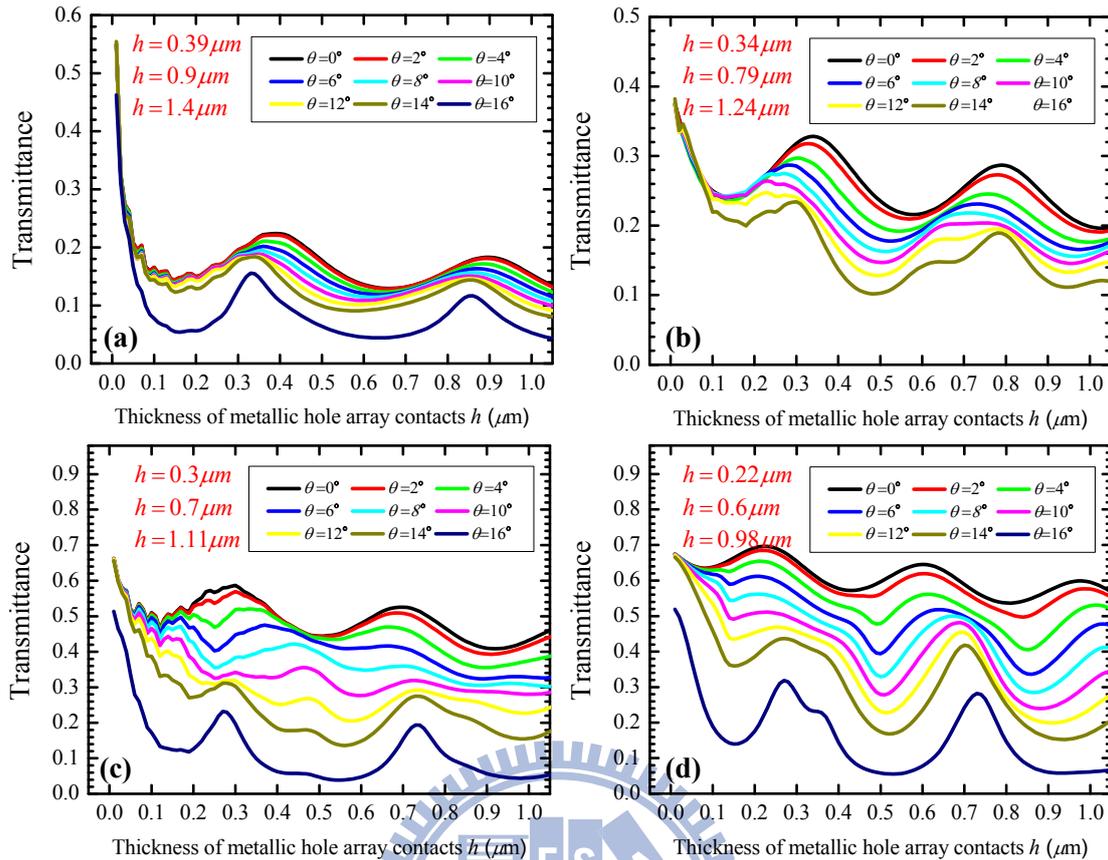


圖 3.13 改變入射光 $\theta = 0 \sim 16^\circ$ ，觀察不同金屬孔洞長度 a 與不同電極厚度下的穿透率，發現第一階 Fabry-Perot 建設性干涉發生的厚度隨著孔洞長度縮小而增加。(a) $a=0.27$ (b) $a=0.29$ (c) $a=0.31$ (d) $a=0.33 \mu\text{m}$ 。

3-8 金屬孔洞電極週期長度分析

填充 SiO_2 、 $h=0.1 \mu\text{m}$ ，固定金屬孔洞電極週期與孔洞長度比值 ($A/a=0.35/0.33 \mu\text{m}$) 並將其等比例縮小及放大所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率如表 3.5，模擬結果如圖 3.14。可以發現 EQE 隨著週期長度及孔洞長度等比例放大而提升，原因在於穿透率上升、金屬損耗下降以及散射機率增加如表 3.5。在我們模擬中假設電流擴散分佈在 x-y 平面上是均勻的，實際上必須控制週期使得電流擴散長度約等於 $a/2$ ，才能使整個孔洞內均勻發光。模擬中沒有計算

電流擴散長度無法得知最佳放大比例，只能得到當週期與孔洞長度等比例放大其外部量子效率越好，真實情況下過度的放大會使得孔洞長度大於電流擴散長度而發光不均勻。

Ratio	Transmittance (%)	Reflectance (%)	Loss (%)	γ (%)
0.666	1.9866	92.11	5.9034	0.088915427
1	2.356	94.3476	3.2964	0.132064833
1.5	2.5388	95.1475	2.3137	0.119919073
2	2.6591	95.3266	2.0143	0.142142907
2.5	2.7406	95.3342	1.9252	0.158390168
3	2.8018	95.2516	1.9466	0.212279899
3.5	2.878	95.1742	1.9478	0.267929754
4	2.9118	95.1098	1.9784	0.268742022
4.5	2.9626	95.019	2.0184	0.26689399
5	2.9854	94.9144	2.1002	0.265713106

表 3.5 固定 $A/a = 0.35/0.33\mu\text{m}$ 比值並將其長度等比例縮小及放大所得到的穿透率、反射率、金屬損耗及散射機率。

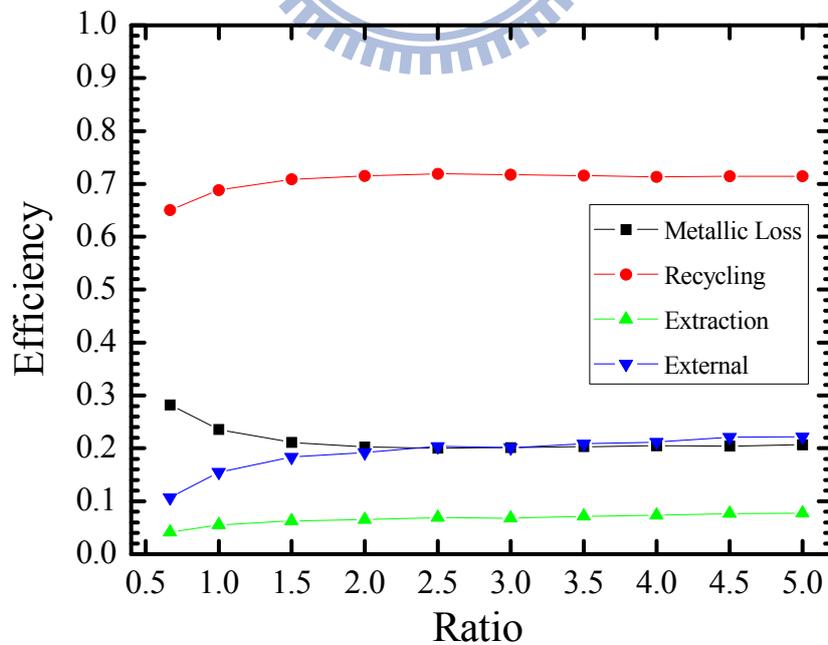


圖 3.14 模擬結果。固定 $A/a = 0.35/0.33\mu\text{m}$ 比值並將其長度等比例縮小及放大所得的金屬損耗效率、光子循環效率、光萃取效率及外部量子效率。

3-9 最佳化表面粗化結構

表面粗化結構可以藉由不同的粗糙界面法向量改變光子反射路徑，使反射角有機會小於臨界角。前面章節提到在固定入射角情況下，不同粗糙界面法向量(與平面法向量夾 θ_n 角)發生的機率取決於表面粗糙度 $\cos^{n_{st}} \theta_n$ 的 n_{st} 值及入射光所看到界面截面積 $S(\theta_i, \theta_n) = \cos(\theta_i - \theta_n)$ 的乘積。例如當入射角 $\theta_i = 30^\circ$ ，則不同粗糙界面法向量在不同表面粗糙度($n_{st} = 1 \sim 5000$)下的機率分佈如圖 3.15。

入射角 $\theta_i = 30^\circ$ 對於傳統平面式界面而言大於臨界角 16° ，無法穿透只能全反射直到吸收損耗。然而表面粗化結構使得入射光看到粗糙界面法向量後，入射角小於臨界角如圖 3.16。兩條虛線及不同 n_{st} 線段以下所包圍的機率面積是外部量子效率提升的主因。模擬結果如圖 3.16 發現 $n_{st} = 5$ 時有最佳外部量子效率(EQE=56.3%)，由圖 3.15 也可以觀察到 $n_{st} = 5$ 在虛線內包圍的機率面積是最大的，然而不同入射角有各自偏好的表面粗糙度 n_{st} 值，表面粗糙度並不是越陡越好或者越平滑越好。此外與預期結果相同當 $n_{st} = 5000$ 對應到平面式結構，對於改變光子反射路徑沒有任何幫助。

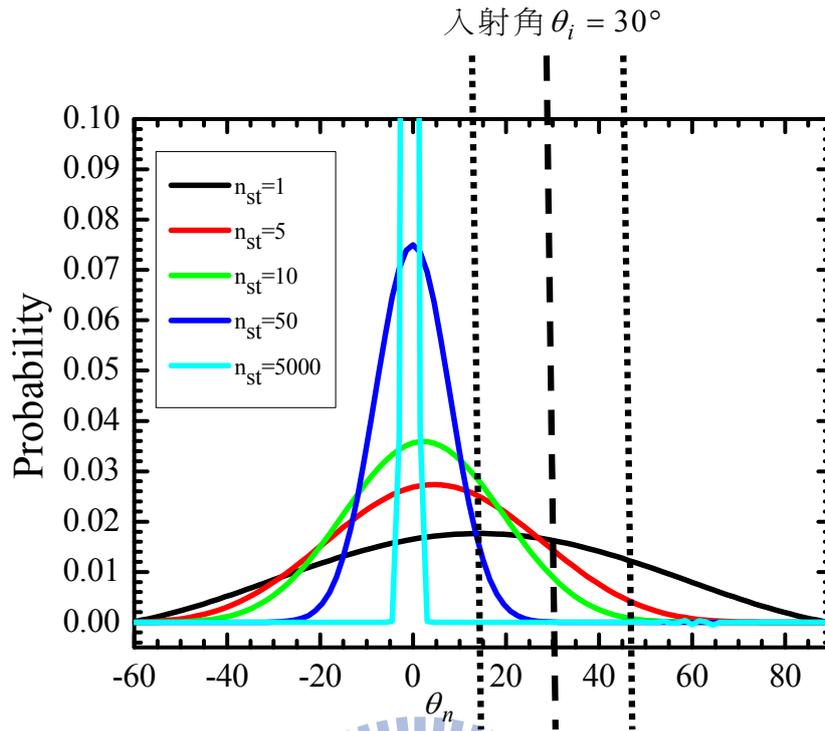


圖 3.15 入射角 $\theta_i = 30^\circ$ ，不同粗糙界面法向量 (θ_n) 在不同表面粗糙度 n_{st} 值之機率分佈。

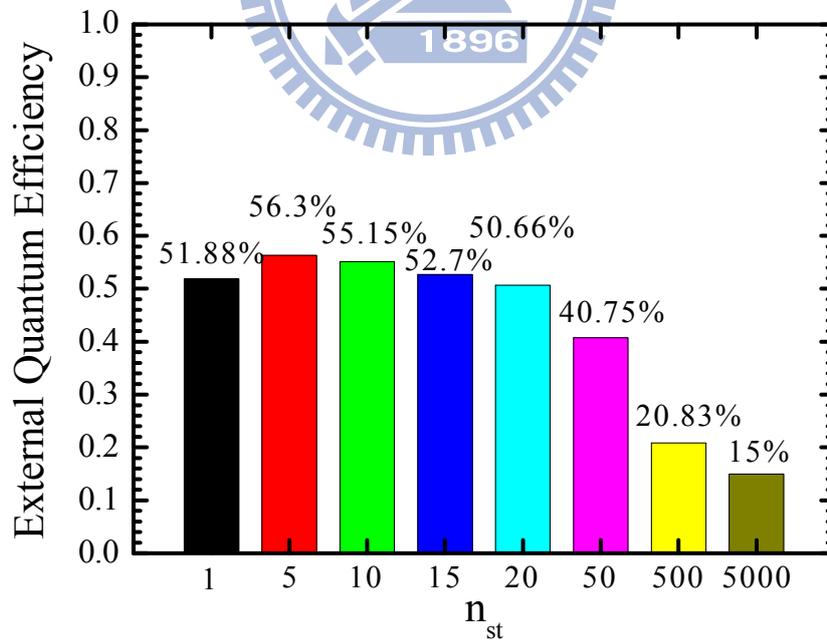


圖 3.16 表面粗化結構在不同表面粗糙度下之外部量子效率。

第四章 結論

金屬孔洞電極結構增加光萃取效率的機制為：(1) 入射光藉由激發電極表面態產生共振穿透使得大於臨界角的入射光仍有微量穿透率。(2) 週期性孔洞結構所產生的布拉格散射機制使得大角度入射光有機會被散射到光錐內。此外該結構也提供良好的電流擴散均勻性及導熱性。

即使孔洞內填充 SiO_2 介電值會增加金屬損耗，仍可藉由傳播模態提升穿透率以及散射機率的提升來增加元件外部量子效率。研究中發現孔洞與週期長度 A/a 比例必須控制恰當，在固定週期長度 $A=0.35 \mu\text{m}$ 下，過小的孔洞長度 $a \leq 0.31 \mu\text{m}$ 會有較低的穿透率及較高的金屬損耗導致外部量子效率下降。過大的孔洞長度就算有較高的穿透率及較低的金屬損耗，卻因為布拉格散射機制的降低使得外部量子效率下降。針對不同的孔洞長度 a 其電極厚度也會影響，必須將電極厚度設計在第一階 Fabry-Perot 干涉的位置才能有最好的外部量子效率。此外觀察發現孔洞的長度越小則電極厚度需較厚才能達到第一階 Fabry-Perot 干涉。

固定週期與孔洞長度比值並等比例放大與縮小其長度，發現隨著比例放大可以提升外部量子效率，然而實際上仍需考慮電流擴散長度來設計孔洞大小使孔洞均勻發光。

表面粗化結構($n_{st}=5$)外部量子效率 56.3%，傳統平面式結構外部量子效率 13.25%。金屬孔洞電極結構當主動層厚度 100nm、 $A/a=0.35/0.33\mu m$ 、金屬電極厚度 $h=0.1\mu m$ 對應外部量子效率 15.5%。當主動層厚度由 100nm 增加為 $1.5\mu m$ ，外部量子效率由 15.5% 增為 23.3%。當金屬電極厚度由 $h=0.1\mu m$ 增加為 $h=0.3\mu m$ ，外部量子效率由 15.5% 增為 18.8%。當週期與孔洞長度等比值放大 5 倍，外部量子效率由 15.5% 增為 22.2%。由此可知在各方面最佳化下金屬孔洞電極結構可以比傳統平面式電極結構有更高的外部量子效率。實際上我們高估所有計算結構的外部量子效率，原因在於本論文中假設電流在 $x-y$ 平面上均勻分佈，沒有考慮電流擴散均勻性問題。電流擴散長度太短則大量輻射光被電極阻擋無法逃脫元件使得外部量子效率下降，此外高電流注入下電流也會在注入區域產生侷限現象 (Localize)。

參考文獻

- [1] H. J. Round, *Electrical World*, **19**, 309 (1907)
- [2] R. M. Potter *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **40**, 2253 (1969)
- [3] J. A. Edmond *et al.*, *Physica B*, **185**, 453 (1993)
- [4] Jr. N. Holonyak, and S. F. Bevacqua, *Appl.Phys. Lett.*, **1**, 82 (1962)
- [5] C. J. Nuese *et al.*, *J. Electrochem. Soc. : Solid State Sci.*, **116**, 248 (1969)
- [6] J. W. Allen *et al.*, *Solid State Electronics*, **6**, 95 (1963)
- [7] R. A. Logan *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **13**, 139 (1968)
- [8] J. Nishizawa *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **54**, 5 (1982)
- [9] H. Ishiguro *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **43**, 11 (1983)
- [10] C. P. Kuo *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **57**, 27 (1990)
- [11] H. Sugawara *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **58**, 10 (1990)
- [12] K. H. Huang *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **61**, 9 (1992)
- [13] H. Sugawara *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **33**, pp.6195-6198 (1993)
- [14] F. A. Kish *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **64**, 21 (1994)
- [15] M. R. Krames *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **75**, 16 (1999)
- [16] R. H. Horng *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **75**, 20 (1999)
- [17] H. Amano *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **48**, pp.353-355 (1986)
- [18] H. Amano *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **28**, L 2112-2114 (1989)
- [19] S. Nakamura *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **31**, L 139-142 (1992)
- [20] G. B. Stringfellow and M. G. Craford, *Eds.*, *High Brightness Light Emitting Diodes*, vol. 48 of *Semiconductors and Semimetals*, Academic Press, San Diego, (1997)
- [21] A. A. Bergh and R. H. Saul, *U.S. Patent*, 3,739,217 (1973)
- [22] I. Schnitzer *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **63**, 16 (1993)
- [23] S. C. Shu *et al.*, *IEEE Photo. Techno. Lett.*, **18**, pp. 2472-2474 (2006)
- [24] E. F. Schubert *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **60**, 8 (1992)
- [25] S. J. Lee, *Applied Optics.*, **40**, 9 (2001)
- [26] L. Li, *J. Opt. Soc. Am. A*, **14**, 2758 (1997)
- [27] V. N. Abakumov *et al.*, *Nonradiative Recombination in Semiconductor*, (1991)
- [28] W. Shockley and W. T. Read, *Phys. Rev.*, **87**, 835 (1952)
- [29] I. Schnitzer *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **62**, 131 (1993)
- [30] R. Widisch *et al.*, *Appl.Phys. Lett.*, **79**, 2315 (2001)
- [31] J. S. Blakemore, *Semiconductor Statistics* (1962)

- [32] C. N. Wolfe *et al.*, *Physical Properties of Semiconductors* (1989)
- [33] K. Horio and H. Yanai., *IEEE Trans. Electron. Devices.*, **37**, 1093 (1990)
- [34] M. D. Ulrich *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **90**, 1625 (2001)
- [35] Randolphe. Bank, *IEEE Trans. Electron. Devices.*, **30**, 9 (1983)
- [36] J. W. Parks *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **82**, 7 (1997)
- [37] H. Benisty *et al.*, *IEEE Trans. Electron. Devices.*, **34**, 9 (1998)
- [38] Hong-Wen Hsieh, “*Study of Extraordinary Optical Transmission Theory and Application*” , NCTU, master thesis in electronic engineering department, (201007)
- [39] Oskari Heikkila *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **105**, 093119 (2009)



簡歷

姓名：廖宏韋

性別：男

出生日期：75年1月9日

學歷：國立中央大學物理系 (93.9~97.6)

國立交通大學電子研究所碩士班 (97.9~99.9)

碩士論文題目：利用金屬孔洞電極提升發光二極體之外部量子效率

Enhancement of the external efficiency of
light-emitting diodes by using metallic hole array
contacts

信箱：hwliao01@gmail.com

