

國立交通大學

電子工程學系 電子研究所

碩 士 論 文

半導體電激發光致冷元件之降溫極限的探討

Investigation on the ultimate cooling temperature of semiconductor
electroluminescent refrigerators

1896

研 究 生：林芳如

指 導 教 授：顏順通 教授

中 華 民 國 一 百 年 十 月

半導體電激發光致冷元件之降溫極限的探討

Investigation on the ultimate cooling temperature of semiconductor
electroluminescent refrigerators

研究生：林芳如

Student : Fong-Ru Lin

指導教授：顏順通

Advisor : Dr. Shun-Tung Yen

國立交通大學

電子工程學系 電子研究所

碩士論文

A Thesis

Submitted to Department of Electronics Engineering and
Institute of Electronics

College of Electrical and Computer Engineering

National Chiao Tung University

in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master of Science

in

Electronics Engineering

October 2011

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國一百年十月

電激發光二極體的冷卻功率的討論與其 降溫極限

學生：林芳如

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

摘要

在本論文中，我們以自洽模型來計算電激發光二極體的冷卻功率，我們探討了在逆偏壓下以載子將能量帶離元件來達到冷卻功率的可能性、雷射輔助發光對正偏壓下的電激發光二極體的冷卻功率的影響，以及可容許電極界面阻抗的最大值；我們也引入了功率守恆方程式來研究電激發光二極體的降溫極限。

我們發現逆偏的操作模式和雷射輔助激發並不適合用來提升元件的冷卻功率。這是因為在逆偏操作模式下的電流值太低；而以雷射輔助激發只有在嚴苛的條件下才有些許的冷卻功率提升。在只考慮熱輻射的理想狀態下，我們發現以 GaAs 為主動層材料的電激發光二極體，於室溫 300 K 的環境下其所能達到的最低溫度為 112 K，優於以 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{P}$ 為主動材料時的最低溫 210 K。

Discussion of the cooling power of electroluminescent LEDs and its lower temperature lowering limit

Student : Fong-Ru Lin

Advisor : Dr. Shun-Tung Yen

Department of Electronics Engineering & Institute of Electronics
National Chiao Tung University

Abstract

In this thesis, we performed a self-consistent calculation to study the cooling performance of electroluminescent (EL) refrigerators. We investigated the cooling feasibility of an EL cooler under a reverse bias, the influence of the laser pumping on the EL refrigeration, and the limiting contact resistance of an EL cooler. Furthermore, by including the power conservation into our calculation, we can evaluate the ultimate cooling temperature of the semiconductor EL cooler.

We showed that neither operating a semiconductor EL cooler at a reverse bias nor applying laser pumping are good methods to improve the cooling capability. This is mainly due to the small current density at the reverse bias and extremely high laser intensity is required to obtain an observable improvement of cooling power. Under the ideal condition that only the thermal radiation is considered, the lowest temperature semiconductor EL coolers with a GaAs active layer can achieve is 112 K. This is better than the lowest temperature 210 K achieved by EL coolers whose active layer is made of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{P}$.

致謝

兩年的碩士生涯接近尾聲，對於即將離開這從大學開始待了六年的地方感到不捨。在交大校園裡、工程四館裡、426 實驗室裡有很多回憶，在這學到了很多，除了學業上的知識、做事的方式與態度外，也讓我更認識自己。

首先我很感謝我的指導教授，顏順通博士。謝謝老師在我的求學過程中給我引導與指示，當我觀念錯誤時耐心的指正我。研究的過程中雖然有很多徬徨迷茫的時候，但在老師的引領下，在畢業前的這一兩個月我終於體會到了物理的美，對此我由衷的感謝。另外也謝謝老師在我出車禍養傷的這段時間對我的體諒、關心與協助，讓我可以適當調整花在養傷與研究上的時間，順利完成論文。

再來，要感謝指導我的李冠成學長。謝謝學長在我沒有頭緒的時候給我具體的方向，在我怠惰的時候盯我進度。學長除了教導我研究的方法外，在我有不懂的地方時耐心的解釋，在程式找不出錯時根據他豐富的經驗告訴我錯可能在這裡，在我無法解釋數據時跟我討論，讓我從一開始搞不清楚狀況的狀態下，最終完成論文。也謝謝學長每學期一次的組聚，增進組內成員感情。

我也非常感謝實驗室的大家，德賢學長、佩鋼學長、泓文學長、同屆的廷誠、佳凡與庭宇，以及學弟韋傑和政紘平日在實驗室的陪伴，一起學習，一起聊天吃東西，使得實驗室生活豐富。也感謝我的大學同學們，和我一起打球吃宵夜，釋放壓力。也謝謝所有人在我出車禍後的關心與幫助，讓我感受到溫暖的人情味。

最後，我非常感謝我的家人。他們給予了我很多的信任與自由，在我面臨人生抉擇時總是鼓勵我放手去做，不會干涉我的決定。而他們除了在精神上成為我的支柱，在我的求學期間裡提供我經濟上的幫助，讓我可以無後顧之憂的專心唸書。出車禍後的日子並不輕鬆，感謝家人的悉心照料與支持，減輕了我的負擔，讓我可以堅持到現在，把該做的事情完成。

目錄

摘要.....	i
Abstract.....	ii
致謝.....	iii
目錄.....	iv
圖目錄.....	vi
表目錄.....	ix
符號說明.....	x
第一章 緒論.....	1
1-1 電激發光二極體(Electroluminescent LED)與光激發光元件 (Photoluminescent device)簡介.....	1
1-2 研究動機與目的.....	2
第二章 計算方法.....	4
2-1 基本方程式與邊界條件.....	4
2-2 電流模型.....	6
2-3 出光效率與光子循環效應.....	11

2-4	冷卻功率.....	12
2-5	功率守恆.....	13
2-6	數值方法.....	13
第三章 結果與討論.....		19
3-1	模擬假設與參數.....	19
3-2	操作在逆偏下的電激發光二極體.....	23
3-3	照光對冷卻功率的影響.....	25
3-4	電極接面阻抗.....	30
3-5	熱傳導係數.....	33
3-5-1	熱傳導係數對元件最低溫度的影響.....	34
3-5-2	元件溫度的雙重解.....	36
3-5-3	主動層長度對元件溫度的影響.....	43
3-5-4	GaInP/InP/InGaA 元件的降溫特性.....	47
3-6	環境溫度對元件降溫極限的影響.....	49
第四章 結論.....		51
參考文獻.....		52
簡歷.....		53

圖目錄

圖 2.1	熱激發電流與穿隧電流示意圖	7
圖 2.2	熱激發電子電流相關參數示意圖	8
圖 2.3	熱激發電洞電流相關參數示意圖	8
圖 2.4	穿隧電流發生處示意圖	9
圖 2.5	穿隧電子電流相關參數示意圖	9
圖 2.6	穿隧電洞電流相關參數示意圖	10
圖 2.7	將連續的塊材切割成不連續的點	14
圖 2.8	異質界面附近的設點方式	14
圖 2.9	數值運算流程圖	18
圖 3.1	載子將能量帶離元件的示意圖	24
圖 3.2	以 GaAs 為主動層且披覆層摻雜濃度低的電激發光二極體結構	24
圖 3.3	元件在逆偏壓下的電流與冷卻功率	25
圖 3.4	載子濃度隨能量的分佈	26
圖 3.5	電子電洞復合時，所釋放的光子的平均能量大於產生電子電洞對所須吸收的能量。	27
圖 3.6	以 GaAs 為主動層且披覆層摻雜濃度高的電激發光二極體結構	27
圖 3.7	在光萃取效率為 1，元件溫度 300 K 下，照射雷射光對元件的冷卻功率的影響	28
圖 3.8	載子注入效率、與內部量子效率皆為 1 時，主動層載子守恆示意圖	29
圖 3.9	元件溫度 300 K 下，光萃取效率對冷卻功率的影響	30
圖 3.10	偏壓、雷射光照強度與最大電極阻抗的關係	32
圖 3.11	在光萃取效率與輻射係數皆為 1，環境溫度 300 K 的狀況下，元件溫度的變化。當熱傳導被完全隔絕時元件可以到最低溫度 112 K。	34

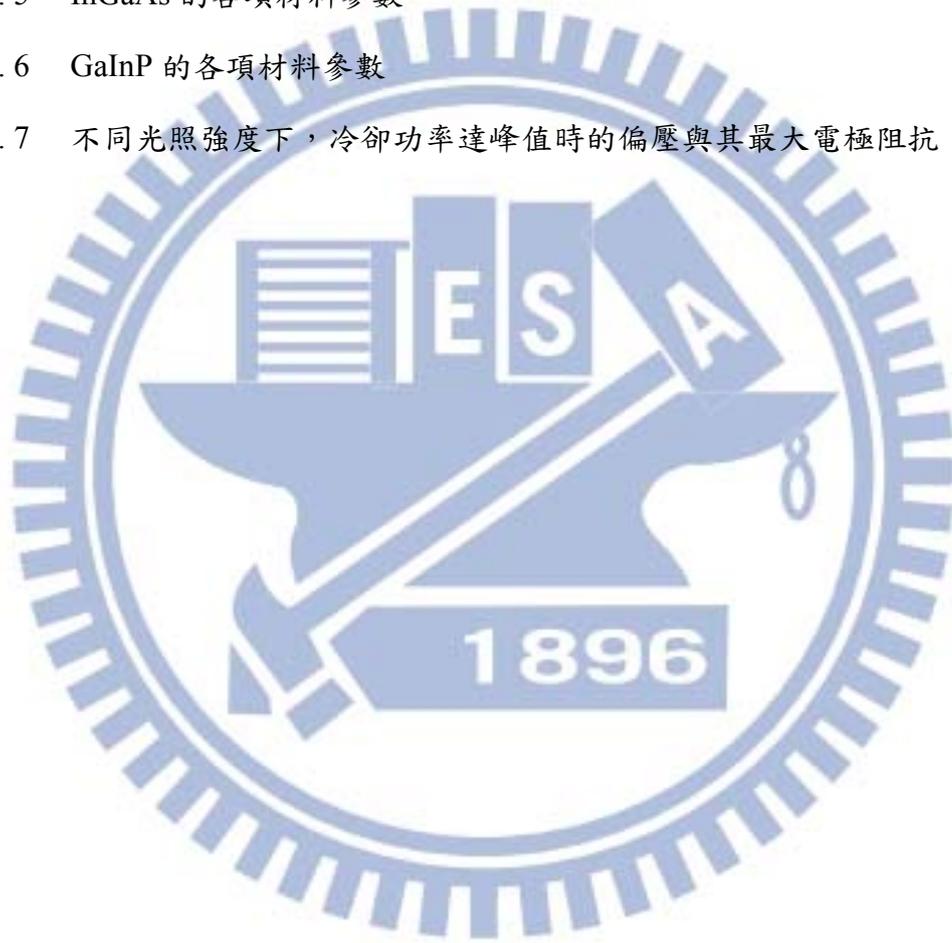
圖 3.12	在不考慮環境能量流入元件的情況下，元件在不同偏壓與不同溫度下的冷卻功率。圖中曲線與熱輻射冷卻功率曲線的交點的溫度為只考慮熱輻射時，固定偏壓與環境溫度(300 K)下的元件溫度解。	36
圖 3.13	固定環境溫度與偏壓下的雙重解	37
圖 3.14	固定環境溫度，改變偏壓時，元件溫度變化趨勢示意圖，圖中點線為熱輻射功率。	38
圖 3.15	固定偏壓，改變環境溫度時，元件溫度變化趨勢示意圖，圖中兩條斜線為不同環境溫度下的熱輻射功率。	39
圖 3.16	元件溫度等於環境溫度 300 K，直接通上使元件冷卻功率為零的偏壓後，稍微改變偏壓所造成的元件溫度變化趨勢，其中點線為熱輻射功率	40
圖 3.17	考慮不同熱傳導係數時，元件穩態的分析圖	42
圖 3.18	元件主動層長度對降溫極限的影響	43
圖 3.19	低偏壓(1.2 V)下，在假設環境溫度等同於元件溫度的假設下，不同主動層長度的元件的冷卻功率對元件溫度的關係曲線。它們和熱輻射曲線的交點，即為考慮環境溫度為 300 K 且只考慮熱輻射不考慮熱傳導下的元件溫度解。	44
圖 3.20	高偏壓(1.5 V)下，在假設環境溫度等同於元件溫度的假設下，不同主動層長度的元件的冷卻功率對元件溫度的關係曲線。它們和熱輻射曲線的交點，即為考慮環境溫度為 300 K 且只考慮熱輻射不考慮熱傳導下的元件溫度解。	45
圖 3.21	光萃取效率對元件降溫極限的影響	46
圖 3.22	輻射係數對元件降溫極限的影響	46
圖 3.23	以 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 為主動層的電激發光二極體結構	47
圖 3.24	假設元件溫度等於環境溫度 300 K 時，冷卻功率對外加偏壓的關係	48
圖 3.25	假設熱傳導係數為 22.7 W/Kcm 時，元件如圖 3.23 的降溫極限	48

圖 3.26 假設熱傳導係數為 0 W/Kcm 時，元件如圖 3.23 的降溫極限	49
圖 3.27 假設在熱傳導係數為零時，元件在不同環境溫度與偏壓下的溫度	50
圖 3.28 假設在熱傳導係數為零時，不同環境溫度對降溫極限的影響	50



表目錄

表 3.1	基本參數	20
表 3.2	GaAs 的各項材料參數	21
表 3.3	AlGaAs 的各項材料參數	21
表 3.4	InP 的各項材料參數	22
表 3.5	InGaAs 的各項材料參數	22
表 3.6	GaInP 的各項材料參數	23
表 3.7	不同光照強度下，冷卻功率達峰值時的偏壓與其最大電極阻抗	33



符號說明

A : Richardson constant	J_n : Electron current density
C_n : n-type Auger coefficient	J_p : Hole current density
C_p : p-type Auger coefficient	k_B : Boltzmann constant
E_a : Acceptor level energy	m_c^* : Electron effective mass
E_c : Conduction band energy	$m_{v,HH}^*$: Heavy hole effective mass
E_d : Donor level energy	$m_{v,LH}^*$: Light hole effective mass
E_g : Bandgap	N_a : n-type doping concentration
E_v : Valance band energy	N_a^- : Acceptor ionization concentration
E_{fc} : Electron quasi-Fermi level energy	N_c : Effective electron density of state
E_{fv} : Hole quasi-Fermi level energy	N_d : p-type doping concentration
$\hbar\omega$: photon energy	N_d^+ : Donor ionization concentration
G : Net generation rate	N_v : Effective hole density of state
g_a : Ground state degeneracy factor for acceptor levels	n_i : Carrier concentration under thermal equilibrium
g_d : Ground state degeneracy factor for donor levels	R : Net recombination rate
I : Laser intensity	R_{Aug} : Auger recombination rate
J : Net current density	R_{Rad} : Radiative recombination rate

R_{SRH} : Shockley-Read-Hall

recombination rate

r : Spontaneous emission rate

T : Device temperature

T_e : Environment temperature

α : Absorption coefficient

ε : Emissivity

ε_0 : Dielectric constant in vacuum

ε_r : Relative dielectric constant

η_{pr} : Photon recycling coefficient

η_{xp} : Extraction efficiency

μ_n : Electron mobility

μ_p : Hole mobility

σ : Stepan-Boltzmann constant

τ_n : Electron lifetime

τ_p : Hole lifetime

ϕ : Potential



第一章 緒論

1-1 電激發光二極體(Electroluminescent LED)與光

激發光元件(Photoluminescent device)簡介

我們可以利用發光二極體的發光特性，將能量轉換成光，再以光的形式離開元件。在能量轉換的過程中，涉及和晶格的熱交換，所以有機會將晶體中的熱能以光的形式帶出元件而達到降溫的目的。而發光的機制主要可以分成電激發光與光激發光兩種。

電激發光是在元件上施加正偏壓，將電子電洞注入發光二極體的主動層。電子電洞對會透過復合的機制消失，其中輻射復合會將電子電洞對的能量轉換成光。若平均光子能量 $\langle \hbar\omega \rangle$ 大於將一對電子電洞注入主動層所需的能量 qV 時，就有機會有冷卻效果。當然，元件是否有冷卻的效果不能單就 $\langle \hbar\omega \rangle$ 是否大於 qV 來決定。這還牽涉到了漏電流大小、輻射復合率和總復合率的比例、出光效率及光子循環效應等複雜的機制。

光激發光則是以約等於主動層能隙的光照射元件，使得主動層中價電帶上的電子吸收光子的能量躍上傳導帶，在價電帶上留下電洞，形成電子電洞對。傳導帶上的電子與價電帶上的電洞會吸收聲子而躍上更高的能階，最後輻射復合放出能量較大的光子，達到冷卻的效果。這種放出光子能量大於吸收光子能量的機制稱作反斯托克斯位移(Anti-Stokes shift)或是上轉換發光(Luminescence upconversion)。其冷卻功率除了和電激發光二極體一樣受到輻射復合率和總復合率的比例、出光效率及光子循環效應等機制的影響外，還和元件對照射光源的吸收頻譜相關。

1-2 研究動機與目的

不論是電激發光二極體或是光激發光元件，都是藉由放出光子，以光的形式將能量帶離元件。但是由於半導體折射率過高的關係，導致光萃取效率不高[1]，而造成有些光子無法逃脫元件，這會使得元件的冷卻功率大為下降。因此，在章節3-2中我們將探討，在低偏壓下，是否有可能讓能量由載子攜帶流出元件來達到相當的冷卻功率，而不是以光子的方式離開元件，以避開光萃取效率光效率的問題。

我們也探討雷射光照射是否對電激發光二極體的冷卻功率有幫助。在章節3-3中我們討論不同雷射光照強度以及不同光萃取效率下電激發光二極體的冷卻功率。此外，由於電流流經電極時會產生熱，所以我們在章節3-4中討論元件所能容忍的最大電極界面阻抗。

過去探討電激發光二極體的冷卻功率的文獻，都是沒有仔細考慮熱傳的情況下，討論表面出光、主動層長度...等因素對冷卻功率的影響。但實際上，元件的冷卻功率無論正負，元件和環境間都會有能量的流動。D. V. Seletskiy 等人觀察到Yb摻雜的LiYF₄ 晶體在雷射光照射下，其溫度可以降到 155 K[2]。然而，當溫度降低時， $k_B T$ 會小於Yb的基態或激發態中的不連續能階彼此間的差值，因此這種稀土元素摻雜的塊材很難降溫到 100 K以下[3、4]。但如果使用半導體作為元件材料，由於半導體的價電帶與傳導帶的能量分佈是連續的，所以其元件溫度有機會可以下降至 100 K以下的溫度，然而截至目前為止，還沒有人觀察到半導體降溫的情形[3、4]。2006年G. Rupper等人經由模擬結果提出半導體冷卻元件有機會達到 10 K的低溫[5]。因此，我們在章節3-5與3-6中考慮了元件和環境間的能量傳遞因素，以獲得元件達到穩態時的溫度。

首先在章節3-5-1中我們討論熱傳導係數對元件降溫的影響，並討論在最理想的情況下(熱傳導係數為零，能量傳遞的途徑只有熱輻射)，元件所能達到的最

低溫度。在章節3-5-2中我們解釋在固定偏壓與環境溫度的狀態下，會有兩組穩態解的原因，並探討這兩個解的合理性。元件降溫的幅度和其冷卻功率正相關，而過去的文獻[7]上記載，在主動層長度增加時，冷卻功率會提高，所以我們接著在章節3-5-3中討論主動層長度對元件降溫極限的影響。除了GaAs/AlGaAs外，InGaAs/InP也是技術發展成熟的半導體材料。章節3-5-4中我們探討使用InGaAs/InP材料的電激發光二極體是否有可能改善電激發光二極體的冷卻特性。最後，章節3-6中我們將討論在不同環境溫度下電激發光二極體的降溫幅度與其降溫極限。



第二章 計算方法

在定溫下，元件的載子分佈與電流等穩態特性可藉由位能、電子準費米能階與電洞準費米能階來描述。位能與電子電洞準費米能階分別遵守泊松方程式 (Poisson equation) 與電子電洞連續方程式 (Continuity equations)。而在考慮元件溫度變化時(在固定的環境溫度下)，我們還須引入功率守恆方程式來考慮元件和環境間的能量流動，以求得穩態解。在本章節中，我們將介紹本篇論文所使用的基本方程式以及邊界條件，並對所使用的數值技巧做一簡單的介紹。

2-1 基本方程式與邊界條件

在熱平衡狀態下，電流為零，電子與電洞的準費米能階在整個元件中皆為定值，故只需解泊松方程式：

$$-\frac{d}{dx}\epsilon_r(x)\frac{d}{dx}\phi(x) = \frac{q}{\epsilon_0} [p(x) - n(x) + N_d^+(x) - N_a^-(x)], \quad (2.1)$$

來求得位能 $\phi(x)$ ，進而求得能帶圖與載子分佈。

在外加偏壓或照光的非熱平衡狀態下，達到穩態時電流為一非零的定值，此時需額外加入電子與電洞的連續方程式，以求得準費米能階的分佈變化：

$$\frac{dJ_n(x)}{dx} = q[R(x) - G(x)], \quad (2.2)$$

$$\frac{dJ_p(x)}{dx} = -q[R(x) - G(x)] \quad (2.3)$$

其中載子濃度與摻雜雜質解離濃度的計算方式如下，

$$p(x) = N_v(x)F_{1/2}(\eta_p), \quad \eta_p = \frac{E_v(x) - E_{fv}(x)}{k_B T}, \quad (2.4)$$

$$n(x) = N_c(x)F_{1/2}(\eta_c), \quad \eta_c = \frac{E_{fc}(x) - E_c(x)}{k_B T}, \quad (2.5)$$

$$N_d^+(x) = \frac{N_d(x)}{1 + g_d e^{\frac{E_{fc}(x) - E_d(x)}{k_B T}}}, \quad (2.6)$$

$$N_a^-(x) = \frac{N_a(x)}{1 + g_a e^{\frac{E_d(x) - E_{fv}(x)}{k_B T}}}, \quad (2.7)$$

載子濃度使用費米-狄拉克分佈計算， $F_{1/2}$ 為費米-狄拉克積分的近似[6]。

R代表電子電洞對的復合率。我們考慮三種電子電洞對的復合機制，分別為蕭客萊-瑞德-霍爾復合(Shockley-Read-Hall recombination)、歐傑復合(Auger Recombination)與輻射復合(Radiative recombination)[7]，可表示成：

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

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

$$R_{Aug}(x) = [C_p(x)p(x) + C_n(x)n(x)][n(x)p(x) - n_i^2(x)], \quad (2.10)$$

$$R_{rad}(x) = \int r(\hbar\omega, x) d\hbar\omega, \quad (2.11)$$

其中

$$r = r_{hh} + r_{lh}, \quad (2.12)$$

$$r_{hh}(\hbar\omega) = \frac{q^2 n_r m_r^{3/2} E_p}{3\sqrt{2}\pi^3 \varepsilon_0 m_0 \hbar^5 c^3} \frac{\hbar\omega \sqrt{\hbar\omega - E_g} \Theta(\hbar\omega - E_g)}{\left[1 - e^{-\eta_n} \exp\left(\frac{m_r}{m_c} \frac{\hbar\omega - E_g}{k_B T}\right)\right] \left[1 - e^{-\eta_p} \exp\left(\frac{m_r}{m_{hh}} \frac{\hbar\omega - E_g}{k_B T}\right)\right]}, \quad (2.13)$$

$$m_r = \frac{m_c m_{hh}}{m_c + m_{hh}}, \quad (2.14)$$

$\Theta(x)$ 為階躍函數(Step function)，將(2.13)與(2.14)中的 m_{hh} 替換成 m_{lh} 即可得到

$$r_{lh}(\hbar\omega)。$$

G代表由外加照光 G_{Laser} ，或是光子循環效應(Photon recycling effect) G_{pr} 等其他因素所造成的電子電洞對生成率。外加照光的假設將在章節3-3中提及，而

光循環效應的部分會在章節2-3中說明。 J_n 與 J_p 分別代表電子與電洞電流，電流模型的說明在下個章節中詳細說明。

泊松方程式描述的是位能分佈，其邊界條件即為外加偏壓。連續方程式描述的是準費米能階的分佈，於此我們假設在元件的兩個端點，表面復合速率(Surface recombination rate)無窮大。所以在此兩端點的載子濃度為熱平衡時的載子濃度，亦即在此兩端點，電子與電洞的準費米能階是相同的。

2-2 電流模型

在本篇論文中，我們利用漂移擴散電流模型(Drift-Diffusion current model)來描述塊材中的電子電洞電流。載子受電場分佈影響而移動造成漂移電流，而載子濃度分佈不均產生的擴散現象則造成擴散電流，可表示如下：

$$J_n(x) = -qn(x)\mu_n \frac{d\phi(x)}{dx} + qD_n \frac{dn(x)}{dx}, \quad (2.15)$$

$$J_p(x) = -qp(x)\mu_p \frac{d\phi(x)}{dx} - qD_p \frac{dp(x)}{dx}, \quad (2.16)$$

亦可表示成：

$$J_n(x) = n(x)\mu_n \frac{dE_{fc}(x)}{dx}, \quad (2.17)$$

$$J_p(x) = p(x)\mu_p \frac{dE_{fv}(x)}{dx}, \quad (2.18)$$

在異質界面處，當傳導帶與價電帶的偏差值小於 $2k_B T$ 時，能障不大，載子可輕易的藉由吸收聲子來越過能障，所以此電流可以用漂移擴散電流來描述。然而當傳導帶與價電帶的偏差值大於 $2k_B T$ 時，聲子無法有效地提供載子越過能障所需的能量，漂移擴散電流無法描述載子遇見能障時的移動行為。此時我們改以熱激發電流模型(Thermionic emission current model)與穿隧電流模型(Tunneling current model)來描述異質界面間的電流。值得一提的是，使用熱激發電流模型與穿隧電流模型將使得電子電洞費米能階在異質界面處不連續。

我們考慮如圖 2.1的異質界面，當載子遇到能障時，可以用下列方式通過能

障[8]:

- (1) 能量大於能障的載子可直接通過。
- (2) 能量低的載子以穿隧效應通過。

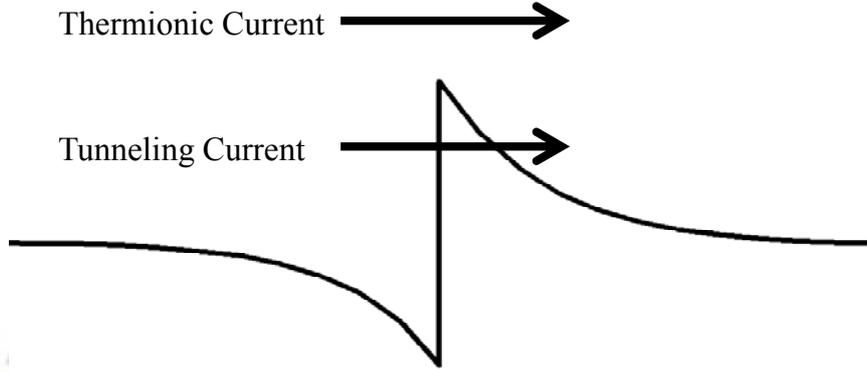


圖 2.1 熱激發電流與穿隧電流示意圖。

常溫下(300 K)，熱激發電流為流過界面的主要電流成分，所以在常溫下，對於一般元件模擬來說，僅考慮熱激發電流會是一個不錯的近似。我們假設只有能量高於能障的載子可以通過能障，不會被能障反射，也就是只考慮電流路徑(1)。此時電流只和溫度、能障高度、界面兩側的載子等效質量與準費米能階有關，如圖 2.2、圖 2.3，電子電流表示如下[9]:

$$J_n = J_{n,\rightarrow} + J_{n,\leftarrow} , \quad (2.19)$$

$$J_{n,\rightarrow} = -A_{n,1}^* T^2 F_1 \left(\frac{-\Delta E_{CB,1}}{k_B T} \right) , \quad (2.20)$$

$$J_{n,\leftarrow} = A_{n,2}^* T^2 F_1 \left(\frac{-\Delta E_{CB,2}}{k_B T} \right) , \quad (2.21)$$

$$A_{n,i}^* = A m_{c,i}^* \quad i = 1, 2 \quad (2.22)$$

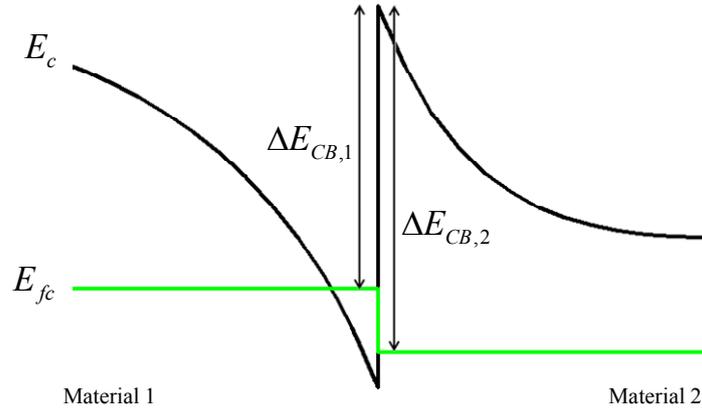


圖 2.2 熱激發電子電流相關參數示意圖。

同理，電洞電流可表示如下：

$$J_p = J_{p,\rightarrow} + J_{p,\leftarrow}, \quad (2.23)$$

$$J_{p,\rightarrow} = A_{p,1}^* T^2 F_1\left(\frac{-\Delta E_{VB,1}}{k_B T}\right), \quad (2.24)$$

$$J_{p,\leftarrow} = -A_{p,2}^* T^2 F_1\left(\frac{-\Delta E_{VB,2}}{k_B T}\right), \quad (2.25)$$

$$A_{p,i}^* = A(m_{v,HH,i}^* + m_{v,LH,i}^*), \quad i=1,2 \quad (2.26)$$

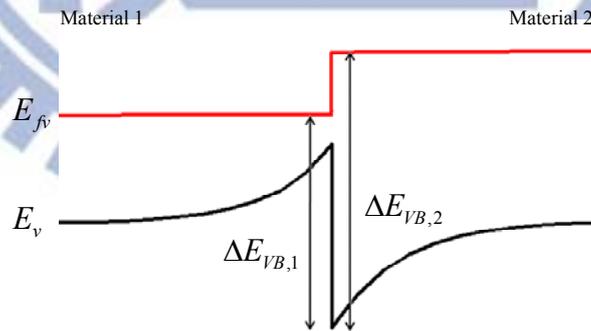


圖 2.3 熱激發電洞電流相關參數示意圖。

但當溫度下降時，熱激發電流會隨著溫度急遽下降，此時穿隧電流將和熱激發電流相當，甚至遠大於熱激發電流，所以在低溫的狀態下我們必須同時考慮熱激發電流與穿隧電流[8]。穿隧電流並不是在每個異質界面都有，如圖 2.4，我

們將在圈起的這幾個異質界面把穿隧電流加入計算。

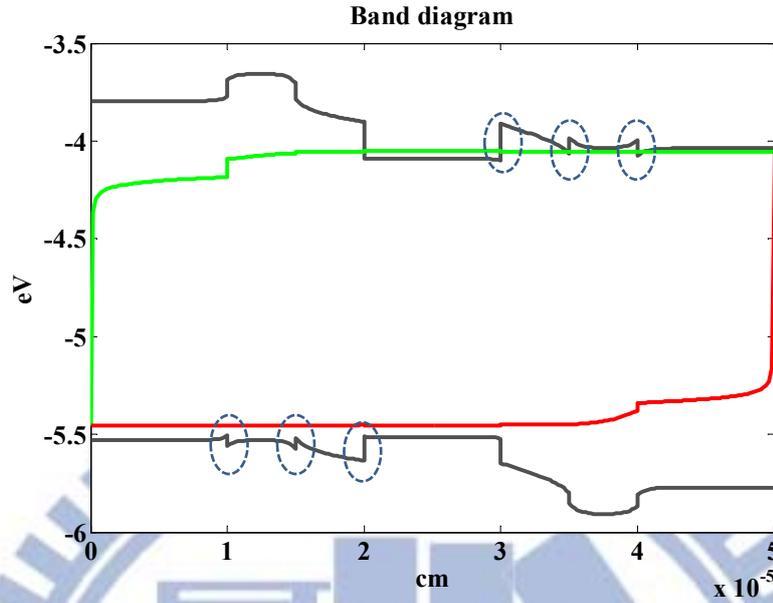


圖 2.4 穿隧電流發生處示意圖。

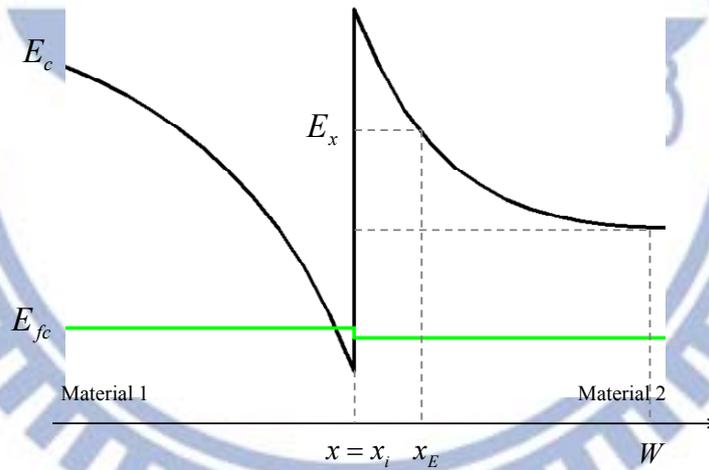


圖 2.5 穿隧電子電流相關參數示意圖。

如圖 2.5，我們以W.K.B.近似(W.K.B. Approximation)來考慮當能量為 E_x 的電子遇到能障時的穿透率[10]:

$$T(E_x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \int_{x_i}^{x_E} \sqrt{2m_c^*(E_c(x) - E_x)} dx\right), & \text{if } E_{\min} \leq E_x \leq E_c(x_i^+) \\ 1, & \text{if } E_c(x_i^+) \leq E_x \end{cases}$$

$$E_{\min} = \max[E_c(x_i^-), E_c(W)] , \quad (2.27)$$

其中穿透率為 1 的部分是在描述熱激發電流，而其他部分描述的則是穿隧電流。

除了穿透率，電流也和載子濃度的能量分布有關，亦即和準費米能階與費米-迪拉克分佈有關。因此，電子熱激發電流與穿隧電流的總合可以表示成[11]:

$$\begin{aligned}
 J_n &= -\int_{E_{\min}}^{\infty} qv_x f\left(\frac{E - E_{fc}(x_i^-)}{k_B T}\right) D(E) T(E_x) dE + \int_{E_{\min}}^{\infty} qv_x f\left(\frac{E - E_{fc}(x_i^+)}{k_B T}\right) D(E) T(E_x) dE \\
 &= -\frac{A_{n,1}^* T}{k_B} \int_{E_{\min}}^{\infty} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_{fc}(x_i^-) - E_x}{k_B T}\right)\right) T(E_x) dE_x \\
 &\quad + \frac{A_{n,2}^* T}{k_B} \int_{E_{\min}}^{\infty} \ln\left(1 + \exp\left(\frac{E_{fc}(x_i^+) - E_x}{k_B T}\right)\right) T(E_x) dE_x
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

其中 $f(x) = \frac{1}{1 + e^x}$ 為費米-迪拉克分佈函數， $D(E)$ 為能態密度(Density of state)。

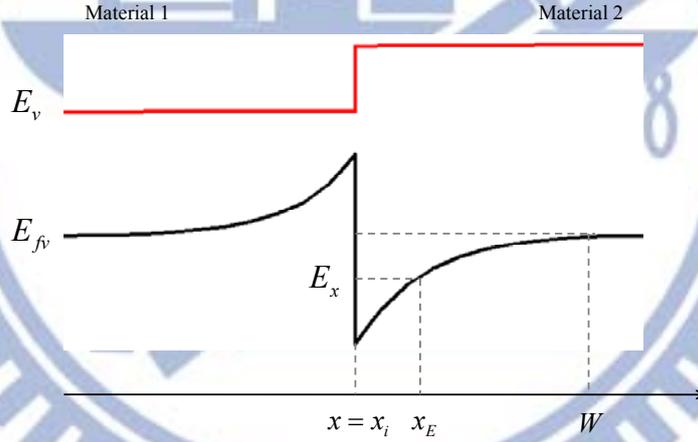


圖 2.6 穿隧電洞電流相關參數示意圖。

同理，參照圖 2.6，重電洞與輕電洞的穿透率可以表分別示成:

$$T_{hh}(E_x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \int_{x_i}^{x_E} \sqrt{2m_{hh}^*(E_x - E_v(x))} dx\right), & \text{if } E_v(x_i^+) \leq E_x \leq E_{\max} \\ 1, & \text{if } E_x \leq E_v(x_i^+) \end{cases},$$

$$T_{lh}(E_x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \int_{x_i}^{x_E} \sqrt{2m_{lh}^*(E_x - E_v(x))} dx\right), & \text{if } E_v(x_i^+) \leq E_x \leq E_{\max} \\ 1, & \text{if } E_x \leq E_v(x_i^+) \end{cases},$$

$$E_{\max} = \max[E_v(x_i^-), E_v(W)] \quad (2.29)$$

電洞電流為：

$$\begin{aligned}
J_p = & \frac{A_{p,hh,1}^* T}{k_B} \int_{-\infty}^{E_{\max}} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_x - E_{fv}(x_i^-)}{k_B T} \right) \right) T_{hh}(E_x) dE_x \\
& - \frac{A_{p,hh,2}^* T}{k_B} \int_{-\infty}^{E_{\max}} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_x - E_{fv}(x_i^+)}{k_B T} \right) \right) T_{hh}(E_x) dE_x \\
& + \frac{A_{p,lh,1}^* T}{k_B} \int_{-\infty}^{E_{\max}} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_x - E_{fv}(x_i^-)}{k_B T} \right) \right) T_{lh}(E_x) dE_x \\
& - \frac{A_{p,lh,2}^* T}{k_B} \int_{-\infty}^{E_{\max}} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_x - E_{fv}(x_i^+)}{k_B T} \right) \right) T_{lh}(E_x) dE_x
\end{aligned} \quad (2.30)$$

其中 $A_{p,hh,i}^* = Am_{hh,i}^*$, $A_{p,lh,i}^* = Am_{lh,i}^*$, $i=1,2$ 。

2-3 出光效率與光子循環效應

電子電洞對在主動層輻射復合後會產生光子，這些光子中，一部份可以逃脫元件，剩下的光子會經由一些機制被元件吸收。我們定義逃脫元件的光子數和輻射復合的總光子數的比值為光萃取效率(Extraction efficiency, η_{xp})。

光子在元件內部被吸收的機制有很多種，像是在金屬電極上的損耗、寄生損耗、自由載子吸收、在主動層的吸收...等等。其中主動層吸收光子後產生電子電洞對，此電子電洞對有機會再透過輻射復合產生光子。所以我們定義光子循環效率(Photon recycling efficiency, η_{pr})為在主動層被吸收的光子數與無法逃脫元件的光子總數的比值。

光子在經過一長度 L 的材料後，沒被吸收的機率為 $e^{-\alpha L}$ ，由於 $\alpha L \ll 1$ ，故 $e^{-\alpha L} \cong 1 - \alpha L$ 。所以被吸收的機率 $1 - e^{-\alpha L}$ 可近似成 αL 。我們假設無法逃脫元件的光子不是被主動層吸收形成新的電子電洞對，就是被非主動層吸收產生熱，光子

循環效率可以表示成：

$$\eta_{pr} = \frac{\int_{\text{active layer}} \alpha(x) dx}{\int_{\text{whole device}} \alpha(x) dx} \quad (2.31)$$

當我們考慮光子循環效應時，應考慮在主動層中被吸收的光子所產生的電子電洞對。所以如章節2-1中所提及，電子電洞對生成率 G 應加上一項 G_{pr} 來描述光子循環的現象。為了簡化計算的過程我們假設 G_{pr} 在主動層內各點是定值而得到：

$$G_{pr} = \frac{\eta_{pr}(1-\eta_{xp}) \int_{\text{active layer}} R(x) dx}{\int_{\text{active layer}} dx} \quad (2.32)$$

2-4 冷卻功率

由上述計算的結果，我們可以定義冷卻功率(Cooling power, $P_{cooling}$)：為了維持元件操作於某一穩態條件下，外界所需輸入的功率，

$$P_{cooling} = P_{out} - P_{in} \quad (2.33)$$

需要注意的是，當使用雷射為輔助激發源時，會因為產生光電流而造成電流為負值。

當電流壓差乘積為正時，定義輸入功率與輸出功率為：

$$P_{in} = P_{JV} + P_{Laser\ Pumping}, \quad P_{out} = P_{Emission}, \quad (2.34)$$

而當電流壓差乘積為負時，定義輸入功率與輸出功率為：

$$P_{in} = P_{Laser\ Pumping}, \quad P_{out} = -P_{JV} + P_{Emission} \quad (2.35)$$

當我們考慮不完全出光時，式(2.34)與(2.35)的 $P_{Emission}$ 須修正成 $\eta_{xp} P_{Emission}$ 。

2-5 功率守恆

在章節2-1到2-4的計算之中，我們可以獲得在某一操作溫度下元件的冷卻功率。然而，若是我們想要求得元件在某環境溫度下可以降溫多少度時，我們則需把熱傳導與熱輻射列入考慮。我們考慮在環境溫度維持在 T_e ，元件溫度為 T 的穩態下，功率守恆要求流進元件的功率等於流出元件的功率，即：

$$P_{JV} + P_{Laser\ Pumping} + P_{Blackbody} + P_{Heat} = P_{Emission} \quad (2.36)$$

其中 P_{JV} 為電路對元件的所作的功， $P_{Laser\ Pumping}$ 為元件經由外加照光每秒所獲得的能量， $P_{Blackbody}$ 為元件所獲得的熱輻射功率， P_{Heat} 為元件每秒經由傳導所獲得的能量， $P_{Emission}$ 為元件每秒以輻射復合的方式所放出的能量。可分別表示如下：

$$P_{JV} = JV, \quad (2.37)$$

$$P_{Laser\ Pumping} = \iint I(\hbar\omega, x) a(\hbar\omega, x) d\hbar\omega dx, \quad (2.38)$$

$$P_{Blackbody} = \varepsilon\sigma(T_e^4 - T^4), \quad (2.39)$$

$$P_{Heat} = h(T_e - T), \quad (2.40)$$

$$P_{Emission} = \iint r(\hbar\omega, x) \hbar\omega d\hbar\omega dx, \quad (2.41)$$

其中 $I(\hbar\omega, x)$ 是雷射光照強度， $a(\hbar\omega, x)$ 是元件對雷射光的吸收率。將此功率守恆方程引入自洽運算後，我們即可求得元件達到穩態時的平衡溫度。

2-6 數值方法

章節2-1中，式(2.1)-(2.3)並沒有解析解，所以必須以數值方法來求得 $\phi(x)$ 、 $E_{fc}(x)$ 與 $E_{fv}(x)$ 的解。我們把連續的空間切割成不連續的點，以有限差分(Finite

difference method)的方式來求解。在塊材的部分，點與點之間的距離為 2 奈米，如圖 2.7，但在不同材料的界面處，為了描述界面處準費米能階不連續的現象，我們不在界面上設點，而是在界面的兩邊取兩個距離非常近的點，取 10^{-12} 公分作為其間距，如圖 2.8。 $\phi(x)$ 、 $E_{fc}(x)$ 與 $E_{fv}(x)$ 在實心的點上，而 J_n 與 J_p 則位於兩實心點中間的空心點上[12]。

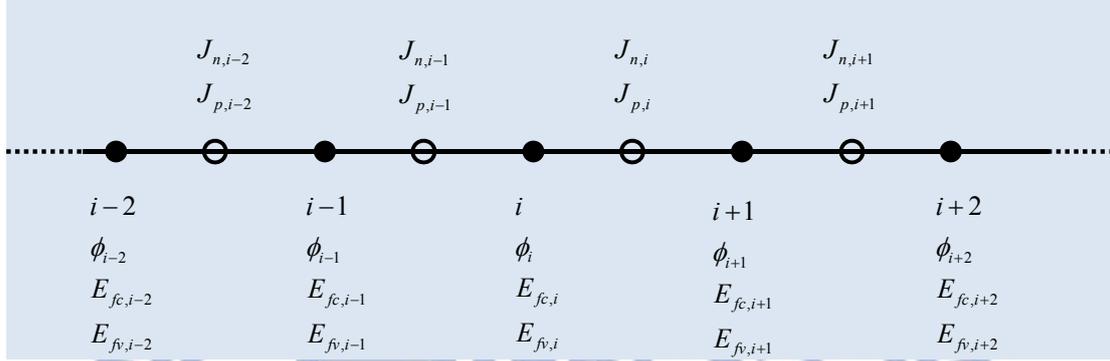


圖 2.7 將連續的塊材切割成不連續的點。

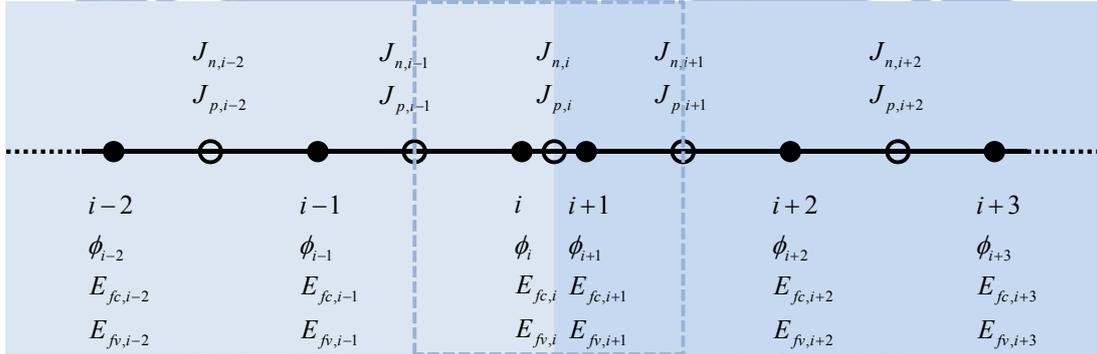


圖 2.8 異質界面附近的設點方式。

把連續的空間切割成不連續的點後，根據所討論的點*i*的位置不同，式(2.

1)-(2.3)，(2.17)與(2.18)可以改寫成:

當*i*點在塊材中:

$$\frac{\frac{\varepsilon_i(\phi_{i+1} - \phi_i)}{\Delta x_i} - \frac{\varepsilon_{i-1}(\phi_i - \phi_{i-1})}{\Delta x_{i-1}}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2}} = -\frac{q}{\varepsilon_0} [p_i - n_i + N_{d,i}^+ - N_{a,i}^-], \quad (2.42)$$

$$\frac{J_{n,i} - J_{n,i-1}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2}} = q[R_i - G_i], \quad (2.43)$$

$$\frac{J_{p,i} - J_{p,i-1}}{\frac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2}} = -q[R_i - G_i], \quad (2.44)$$

$$J_{n,i} = \left(\frac{n_i + n_{i+1}}{2} \right) \left(\frac{\mu_{n,i} + \mu_{n,i+1}}{2} \right) \left(\frac{E_{fc,i+1} - E_{fc,i}}{\Delta x_i} \right), \quad (2.45)$$

$$J_{p,i} = \left(\frac{p_i + p_{i+1}}{2} \right) \left(\frac{\mu_{p,i} + \mu_{p,i+1}}{2} \right) \left(\frac{E_{fv,i+1} - E_{fv,i}}{\Delta x_i} \right), \quad (2.46)$$

當 i 點在不同材料的界面上:

界面兩側的點非常靠近，故假設其位能相等:

$$\phi_i = \phi_{i+1}, \quad (2.47)$$

我們可以在界面上圈一個高斯封閉路徑，如圖 2.8 上的虛線，並以泊松方程式描述:

$$\frac{\varepsilon_{i+1}(\phi_{i+2} - \phi_{i+1})}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\varepsilon_{i-1}(\phi_i - \phi_{i-1})}{\Delta x_{i-1}} = -\frac{q}{2\varepsilon_0} [p_i - n_i + N_{d,i}^+ - N_{a,i}^- + p_{i+1} - n_{i+1} + N_{d,i+1}^+ - N_{a,i+1}^-] \quad (2.48)$$

由於我們在界面處使用熱激發電流模型與穿隧電流模型，所以儘管界面兩側的點非常靠近，我們也不能把這兩點的準費米能階像位能一樣視作相等。但是我們可以把界面上的電流和它旁邊兩點的電流視作相等，因為在這麼短的距離裡，電流的變化非常小。

$$J_{n,i-1} = J_{n,i} = J_{n,i+1}, \quad (2.49)$$

$$J_{p,i-1} = J_{p,i} = J_{p,i+1}, \quad (2.50)$$

$J_{n,i-1}$ 、 $J_{n,i+1}$ 、 $J_{p,i-1}$ 及 $J_{p,i+1}$ 可以式(2.45)和(2.46)表示。但 $J_{n,i}$ 與 $J_{p,i}$ 則必須以熱激

發電流及穿隧電流來描述。

值得一提的是，除了式(2.49)與(2.50)外，也可以用：

$$\frac{J_{n,i+1} - J_{n,i-1}}{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1} + \Delta x_i + \frac{1}{2}\Delta x_{i-1}} = \frac{q}{2}[R_i - G_i + R_{i+1} - G_{i+1}] \quad (2.51)$$

$$J_{n,i} = \frac{J_{n,i+1} + J_{n,i-1}}{2}, \quad (2.52)$$

$$\frac{J_{p,i+1} - J_{p,i-1}}{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1} + \Delta x_i + \frac{1}{2}\Delta x_{i-1}} = -\frac{q}{2}[R_i - G_i + R_{i+1} - G_{i+1}] \quad (2.53)$$

$$J_{p,i} = \frac{J_{p,i+1} + J_{p,i-1}}{2}, \quad (2.54)$$

來描述界面處的準費米能階，式(2.51)和(2.53)所描述的是，在界面處圈出一區域，如圖 2.8，流進和流出此區域的載子數目差即為載子在此區域內複合與產生的總量，亦即符合連續方程式(2.2)與(2.3)。(2.52)和(2.54)則是假設界面上的載子電流是旁邊兩點載子電流的平均。要注意的是，這兩種方式在常溫 300 K 下所模擬出的結果是一致的，但在 150 K 以下的低溫時，使用式(2.51)-(2.54)會使得程式無法穩定收斂。

我們把元件上連續的空間切割成 m 個離散的點，在熱平衡狀態下求 ϕ_i 的解時，要用到式(2.42)、(2.47)及(2.48)，共 m 條方程式。求常溫下的穩態解時，除了以上述 m 條方程式求 ϕ_i 外，還須以式(2.43)、(2.44)、(2.49)及(2.50)來求得 $E_{fc,i}$ 和 $E_{fv,i}$ 總共 $3m$ 條方程式。要求溫度 T 而把功率守恆納入考量時，還要計算(2.36)，共 $3m+1$ 條方程式。

把上述 N 條方程式全整理成：

$$f_n(x) = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2.55)$$

$$x = \{\phi_i, E_{fc,i}, E_{fv,i}\}, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

的形式後，以數值方法 Newton-Raphson method 來求解。

將式(2.55)中 $f_n(x)$ 以其一階泰勒展開式帶入，整理後得到

$$f'_n(x)\Big|_{x=x^0}(x-x^0) = -f_n(x^0) \quad (2.56)$$

其中 $x^0 = \{\phi_i^0, E_{fc,i}^0, E_{fv,i}^0\}$, $i=1,2,\dots,m$ 。

將式(2.56)中的每一條都列出來，可整理成矩陣運算的形式：

$$M(x)\Big|_{x=x^j} \Delta x = f_{\{n\}}(x^j), \quad (2.57)$$

其中

$$M(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial T} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_m(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_m(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_m(x)}{\partial T} \\ \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_{m+1}(x)}{\partial T} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_{2m}(x)}{\partial T} \\ \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_{2m+1}(x)}{\partial T} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_{3m}(x)}{\partial T} \\ \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial \phi_1} & \dots & \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial \phi_m} & \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial E_{fc,1}} & \dots & \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial E_{fc,m}} & \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial E_{fv,1}} & \dots & \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial E_{fv,m}} & \frac{\partial f_{3m+1}(x)}{\partial T} \end{bmatrix}$$

$$\Delta x = x^{j+1} - x^j = \begin{bmatrix} \phi_1^{j+1} - \phi_1^j \\ \vdots \\ \phi_m^{j+1} - \phi_m^j \\ E_{fc,1}^{j+1} - E_{fc,1}^j \\ \vdots \\ E_{fc,m}^{j+1} - E_{fc,m}^j \\ E_{fv,1}^{j+1} - E_{fv,1}^j \\ \vdots \\ E_{fv,m}^{j+1} - E_{fv,m}^j \\ T^{j+1} - T^j \end{bmatrix}, \quad f_{\{n\}}(x^j) = \begin{bmatrix} f_1(x^j) \\ \vdots \\ f_m(x^j) \\ f_{m+1}(x^j) \\ \vdots \\ f_{2m}(x^j) \\ f_{2m+1}(x^j) \\ \vdots \\ f_{3m}(x^j) \\ f_{3m+1}(x^j) \end{bmatrix} \quad (2.58)$$

從式(2.57)可看出，在輸入一組舊的參數 x^j 後，可得到一組新的參數 x^{j+1} ，

$$x^{j+1} = x^j + M^{-1}(x) \Big|_{x=x^j} f_{\{n\}}(x^j), \quad (2.59)$$

當我們得到 x^{j+1} 後，又可以再利用 x^{j+1} 得到 x^{j+2} ，如此反覆疊代直至 x 收斂為止。

而 x^0 則可視為初始值(Initial guess)，合理地選擇初始值才能讓程式適當的收斂。

整體運算流程如圖 2.9:

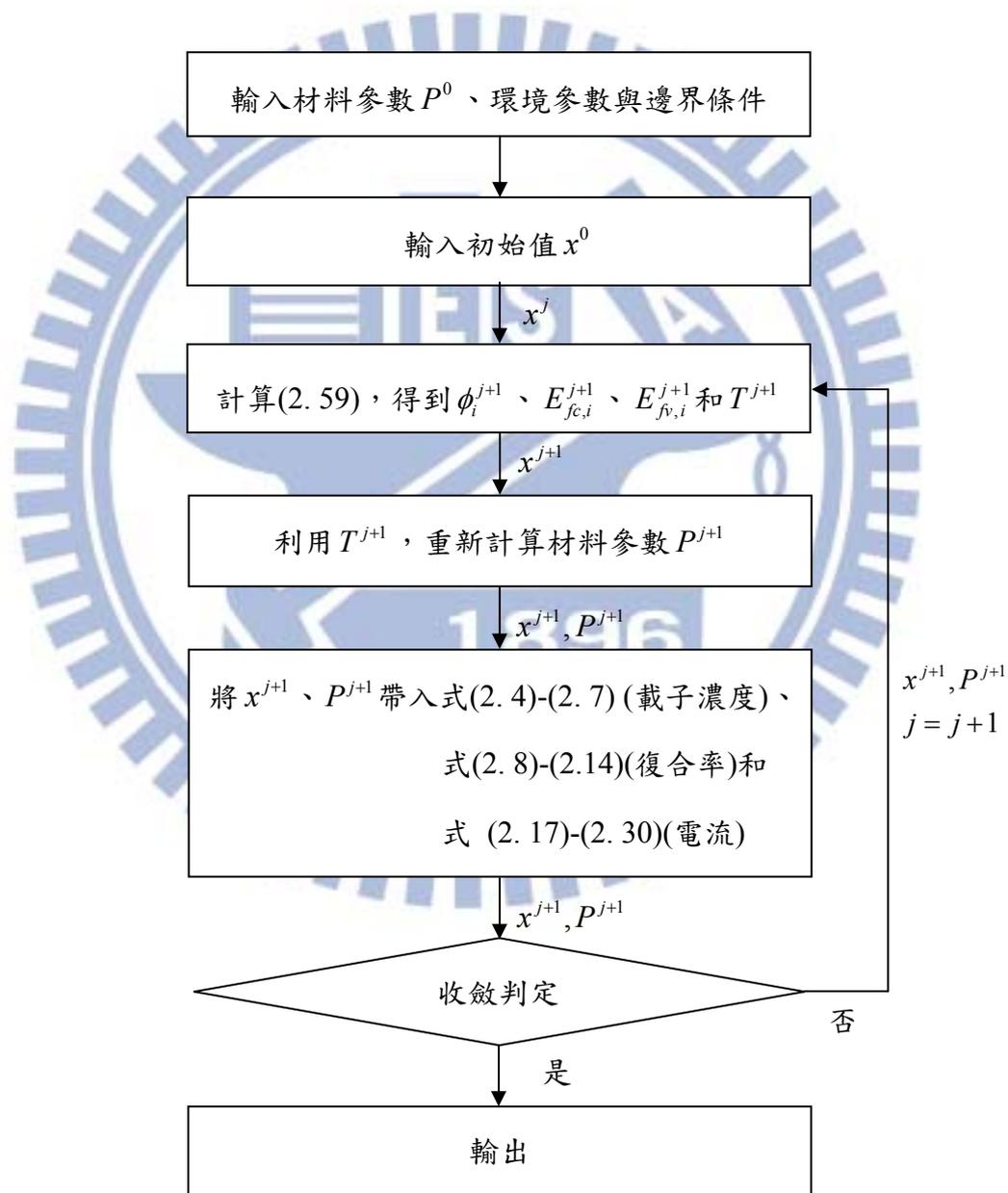


圖 2.9 數值運算流程圖。

第三章 結果與討論

3-1 模擬假設與參數

在第二章中我們已經提到了一些模擬模型所使用的假設:

- (1) 關於邊界條件，在章節2-1中我們假設元件兩端點的表面復合速率為無窮大。另外，在章節2-2中我們說明了在異質材料界面上，根據不同的溫度而考慮不同的造成電流的機制。在2-6中則詳述了數值上在處理材料界面時所作的假設。
- (2) 在章節2-3中提到了光子循環效率與其所造成的電子電洞對生成率的計算方式。在主動層中，我們假設所有吸收了光子的電子都會從價電帶躍遷至傳導帶。主動層所放出的光子波長小於其他非主動層的能隙，這些光子在非主動層中無法提供電子從價電帶躍遷至傳導帶的能量，故在非主動層我們使用自由載子吸收係數作為其吸收係數。在本論文的模擬中，假設吸收係數和溫度無關。

針對模擬所使用的參數我們還作了以下假設:

- (3) 假設載子的溫度和元件的晶格溫度相等。
- (4) 關於載子復合率，在主動層中我們考慮輻射復合、歐傑復合以及蕭客萊-瑞德-霍爾復合，但在非主動層中，我們只考慮蕭客萊-瑞德-霍爾復合。
- (5) 材料的介電係數和溫度與熱膨脹係數有關:

$$\epsilon_r \epsilon_0 = \epsilon \Big|_{T=0K} (1 + \alpha_e T) \quad (3.1)$$

其中熱膨脹係數 α_e 也是溫度的函數，但因為 α_e 的數量級很小，使得溫度對介電係數的影響不大，因此本論文中忽略膨脹係數對溫度的變化。

- (6) 熱輻射功率和輻射係數(Emissivity)有關，而輻射係數和元件材料及其表面有

關，由於無從計算其值，模擬上我們把輻射係數當作一變數輸入，探討輻射係數對元件降溫的影響。

- (7) 光萃取效率和元件材料的折射率及其表面有關，但本論文中沒有實際上去討論這些因素，而是把光萃取效率當作一個變數輸入，討論光萃取效率對冷卻功率及元件降溫的影響。

表 3.1 至表 3.6 為模擬所使用的參數，參數定義請詳見第 x 頁的符號說明：

參數符號	單位	數值
A	$\text{Acm}^{-2}\text{K}^{-2}$	120
k_B	JK^{-1}	1.38×10^{-23}
ϵ_0	Fcm^{-1}	8.854×10^{-14}
σ	$\text{Wcm}^{-2}\text{K}^{-4}$	5.67×10^{-12}
g_a		2
g_d		4
E_a	eV	$E_c - kT$
E_d	eV	$E_v + kT$
m_0	Kg	9.11×10^{-31}

表 3.1 基本參數。

GaAs		
參數符號	單位	數值
α	cm^{-1}	8654
ϵ_r		$12.4(1 + 1.20 \times 10^{-4}T)$
τ_n	s	$1.3 \times 10^{-6} \times (300/T)^{1.5}$
τ_p	s	$1.2 \times 10^{-6} \times (300/T)^{1.5}$
C_n	$\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$	$3.76 \times 10^{-31} + 1.58 \times 10^{-32} \times \exp(T/164.70)$
C_p	$\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$	$1.32 \times 10^{-31} + 4.45 \times 10^{-32} \times \exp(T/95.31)$
m_c^*	m_0	0.063
m_{v-hh}^*	m_0	0.51
m_{v-lh}^*	m_0	0.082
E_g	eV	$1.519 - 5.405 \times 10^{-4} \times T^2 / (T+204)$
N_c	cm^{-3}	$7.64 \times 10^{13} \times T^{1.5}$
N_v	cm^{-3}	$1.87 \times 10^{15} \times T^{1.5}$
μ_n	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$8000 \times (T/300)^{-1}$
μ_p	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$370 \times (T/300)^{-2.3}$

表 3.2 GaAs 的各項材料參數。

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$		
參數符號	單位	數值
α	cm^{-1}	10
ϵ_r		$12.85 \times (1 + (5.97 - 1.76x) \times 10^{-6}T) / (1 + (5.97 - 1.76x) \times 10^{-6}T * 300)$
τ_n	s	$10^{-8} \times (300/T)^{1.5}$
τ_p	s	$10^{-8} \times (300/T)^{1.5}$
m_c^*	m_0	$0.063 + 0.083x$
m_{v-hh}^*	m_0	$0.51 + 0.25x$
m_{v-lh}^*	m_0	$0.082 + 0.068x$
E_g	eV	$1.519 + 1.155x + 0.37x^2 - 5.405 \times 10^{-4} \times T^2 / (T+204)$
N_c	cm^{-3}	$4.82 \times 10^{15} \times T^{1.5} \times (0.063 + 0.083x)^{1.5}$
N_v	cm^{-3}	$4.82 \times 10^{15} \times T^{1.5} \times ((0.51 + 0.25x)^{1.5} + (0.082 + 0.068x)^{1.5})$
μ_n	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$2300 \times (T/300)^{-2}$
μ_p	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$146 \times (T/300)^{-3}$

表 3.3 AlGaAs 的各項材料參數。

InP		
參數符號	單位	數值
ϵ_r		$11.76(1 + 2.26 \times 10^{-4}T)$
τ_n	s	$10^{-8} \times (300/T)^{1.5}$
τ_p	s	$5 \times 10^{-7} \times (300/T)^{1.5}$
m_c^*	m_0	0.08
m_{v-hh}^*	m_0	0.6
m_{v-lh}^*	m_0	0.089
E_g	eV	$1.421 - 4.9 \times 10^{-4} \times T^2 / (T+327)$
N_c	cm^{-3}	$1.1 \times 10^{14} \times T^{1.5}$
N_v	cm^{-3}	$2.2 \times 10^{15} \times T^{1.5}$
μ_n	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$4200 \times (T/300)^{-1}$
μ_p	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$250 \times (T/300)^{-2.2}$

表 3.4 InP 的各項材料參數。

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$		
參數符號	單位	數值
ϵ_r		$12.4 \times (1 + 1.20 \times 10^{-4}T)x + 15.13 * (1 + 4.52 \times 10^{-6}T) \times (1-x)$
τ_n	s	$10^{-6} \times (300/T)^{1.5}$
τ_p	s	$10^{-6} \times (300/T)^{1.5}$
C	$\text{cm}^6 \text{s}^{-1}$	$1.2 \times 10^{-28} + 1.97 \times 10^{-31} \times \exp(T/45.69)$
m_c^*	m_0	$0.023 + 0.037x + 0.003x^2$
m_{v-hh}^*	m_0	$0.41 + 0.1x$
m_{v-lh}^*	m_0	$0.026 + 0.056x$
E_g	eV	$0.42 + 0.63x - (5.8/(T+300) - 4.19/(T+271)) \times 10^{-4}T^2x - 4.19 \times 10^{-4}T^2/(T+271) + 0.48x^2$
N_c	cm^{-3}	$4.82 \times 10^{15} \times T^{1.5} \times (0.023 + 0.037x + 0.003x^2)^{1.5}$
N_v	cm^{-3}	$4.82 \times 10^{15} \times T^{1.5} \times ((0.41 + 0.1x)^{1.5} + (0.026 + 0.056x)^{1.5})$
μ_n	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$11178 \times (T/300)^{-1.57}$
μ_p	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$211 \times (T/300)^{-1.35}$

表 3.5 InGaAs 的各項材料參數。

Ga _x In _{1-x} P		
參數符號	單位	數值
ϵ_r		$11.76 \times (1 + 2.26 \times 10^{-4} T)(1-x) + 11.1 * (1 + 4.65 \times 10^{-6} T) x$
τ_n	s	$(10^{-8} \times (300/T)^{1.5})(1-x) + (2 \times 10^{-7} \times (300/T)^{1.5})x$
τ_p	s	$(5 \times 10^{-7} \times (300/T)^{1.5})(1-x) + (10^{-7} \times (300/T)^{1.5})x$
m_c^*	m_0	$0.08 \times (1-x) + (1.12 \times 0.22^2)^{1/3} x$
m_{v-hh}^*	m_0	$0.6 \times (1-x) + 0.79x$
m_{v-lh}^*	m_0	$0.089 \times (1-x) + 0.148x$
E_g	eV	$(1.42 - 4.9 \times 10^{-4} T^2 / (T+327))(1-x) + (2.34 - 6.1 \times 10^{-4} \times (T^2 / (T+460)))x$
N_c	cm^{-3}	$(1.1 \times 10^{14} \times T^{1.5})(1-x) + (3.4 \times 10^{15} \times T^{1.5})x$
N_v	cm^{-3}	$(2.2 \times 10^{15} \times T^{1.5})(1-x) + (3.6 \times 10^{15} \times T^{1.5})x$
μ_n	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$(10^{-8} \times (300/T)^{1.5}) \times (1-x) + (2 \times 10^{-7} \times (300/T)^{1.5})x$
μ_p	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	$(5 \times 10^{-7} \times (300/T)^{1.5}) \times (1-x) + (10^{-7} \times (300/T)^{1.5})x$

表 3.6 GaInP 的各項材料參數。

3-2 操作在逆偏下的電激發光二極體

電激發光二極體操作在正偏壓下時，其主動層中累積大量的載子，這些過量的載子使得主動層的電子電洞復合率大增，放出大量光子。隨著這些光子的逃脫，能量以光的形式離開元件，使得元件溫度得以下降。一般來說，當電激發光二極體操作在逆偏壓下時，主動層中電子電洞生成率遠大於復合率，無法有效的以光的形式把能量帶離元件。如圖 3.1，從電子電洞對生成到離開元件的過程中，其能量變化為：

- 電子吸收相當於主動層能隙的能量 E_g ，躍遷至傳導帶。
- 電子和電洞分別再吸收 ΔE_c 和 ΔE_v 的能量後，可以離開主動層。
- 受到電場的影響，電子與電洞分別向元件兩端移動，最後離開元件。在移動的同時，電子電洞會釋放出一些能量，分別為 $\Delta E'_c$ 和 $\Delta E'_v$ 。

在這整個電子電洞對從生成到離開元件的過程中，其能量變化為：

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_g + \Delta E_c + \Delta E_v - \Delta E'_c - \Delta E'_v \\ &= E_c(x \text{ at left end}) + E_v(x \text{ at right end}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

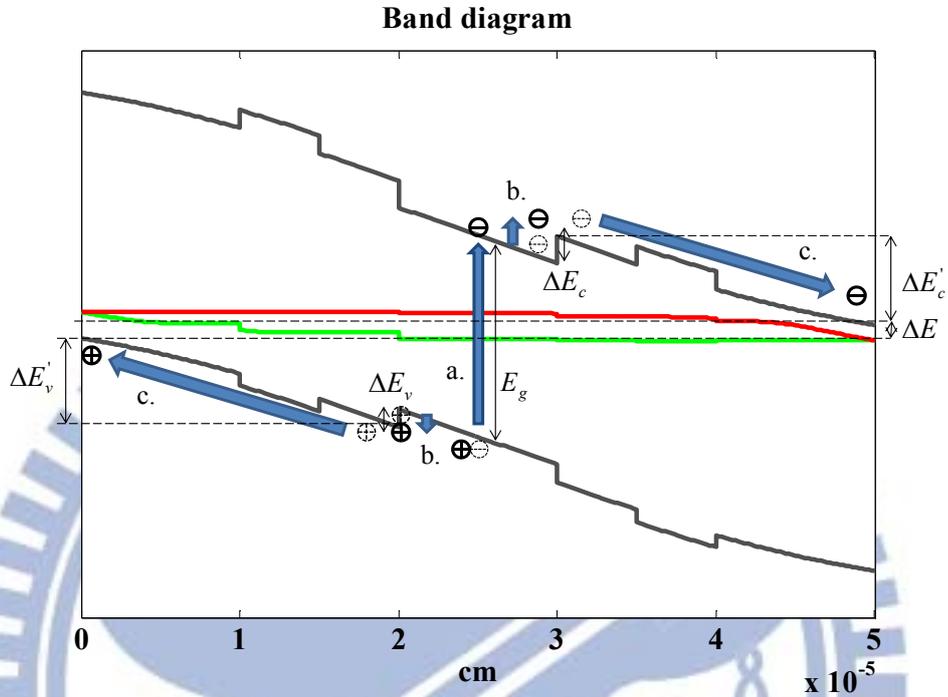


圖 3.1 載子將能量帶離元件的示意圖。

當逆偏壓不大及披覆層的摻雜濃度不高時， ΔE 會是正值，也就是能量被載子帶離元件。所以我們期待元件工作在上述條件下，且在主動層中有很高的電子電洞生成率，使得有足夠多的電子電洞對可藉由上述過程將能量帶離元件而達到冷卻效果。

<i>p</i> -Al _{0.25} Ga _{0.25} As,	100 nm, N _a =1e16
<i>p</i> -Al _{0.35} Ga _{0.65} As,	50 nm, N _a =1e16
<i>i</i> -Al _{0.25} Ga _{0.75} As,	50 nm
<i>i</i> -GaAs active layer,	100 nm
<i>i</i> -Al _{0.35} Ga _{0.65} As,	50 nm
<i>n</i> -Al _{0.35} Ga _{0.65} As,	50 nm, N _d =1e16
<i>n</i> -Al _{0.25} Ga _{0.25} As,	100 nm, N _d =1e16

圖 3.2 以 GaAs 為主動層且披覆層摻雜濃度低的電激發光二極體結構。

模擬所使用的元件結構如圖 3.2，材料的相關參數如表 3.2與表 3.3。我們假設主動層中有很多缺陷，使得電子電洞對更容易產生，以獲得更大的電子電洞對生成率。計算上，我們將主動層的載子生命期設為一較小的值

($\tau_n, \tau_p = 10^{-9} \sim 10^{-11}$)來模擬主動層中缺陷很多的狀況。

在此，冷卻功率的計算方式為：

$$P_{cool} = J_{rad} \left(\frac{\langle \hbar\omega \rangle}{q} - V \right) - (J_{total} - J_{rad}) \frac{\Delta E}{q} \quad (3.3)$$

把主動層載子的生命期調小可以提高主動層的電子電洞對生成率，但在小的負偏壓下，這樣的生成率還沒有大到可以提供足夠的電流來達到可觀的冷卻功率。而當負偏壓稍大時， ΔE 小於零，元件也不會有冷卻的效果，其結果如圖 3.3 所示。

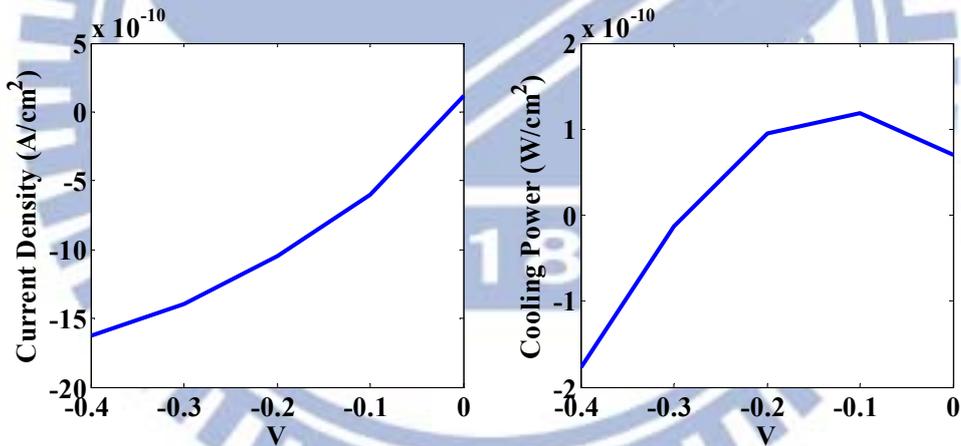


圖 3.3 元件在逆偏壓下的電流與冷卻功率。

3-3 照光對冷卻功率的影響

本章節將討論當電激發光二極體操作在正偏壓下時，照光對其冷卻功率的影響。照光的目的是在於，希望藉由照射光子能量和主動層能隙相符的雷射光

($\hbar\omega = E_g$)，使主動層中的電子電洞對增加。根據費米-迪拉克分佈，當能量靠近

傳導帶與價電帶的能階全被填滿時，其餘的電子電洞勢必吸收熱能，存在於一能

量較高的狀態，如圖 3.4。所以電子電洞復合時，所釋放的光子的平均能量必大於主動層能隙，如圖 3.5，希望可以把更多的能量以光的形式帶走而達到更高的冷卻功率。其中 $\langle h\omega \rangle$ 為放出光子的平均能量。模擬所使用的元件結構如圖 3.6，材料的相關參數如表 3.2 與表 3.3。照光部分，我們假設使用一理想單頻光源，其光子能量等於主動層載子的能隙，入射光子在主動層中被完全吸收，且光子在主動層是均勻地被吸收的。雷射光的輸入功率與光激發電流 J_G 及其相對應的因照光而產生的額外的電子電洞對生成率 G_{Laser} 的關係可以表示成：

$$P_{Laser\ Pumping} = \frac{\hbar\omega}{q} J_G = \frac{\hbar\omega}{q} \left(qG_{Laser} L_{active\ layer} \right) = \hbar\omega G_{Laser} L_{active\ layer} \quad (3.4)$$

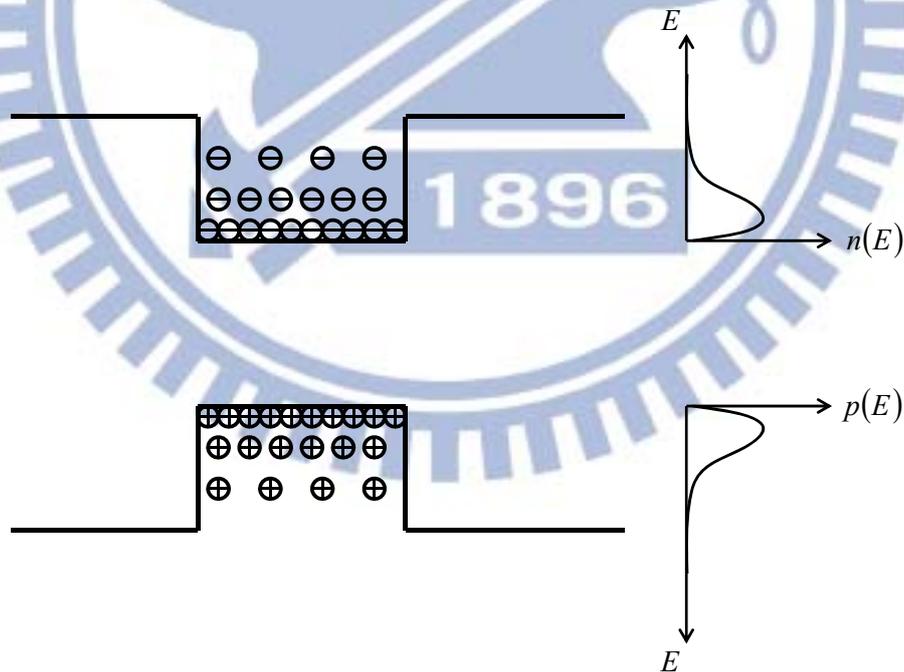


圖 3.4 載子濃度隨能量的分佈。

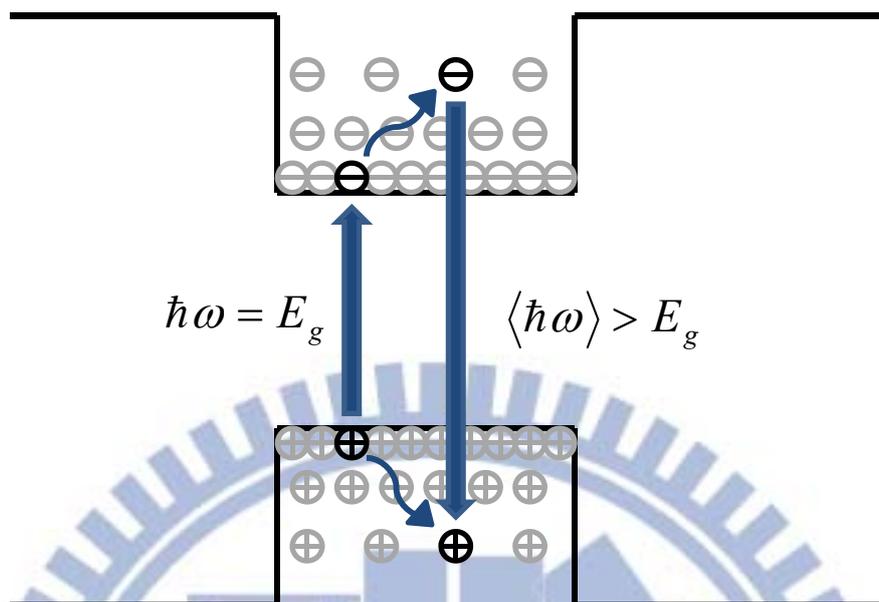


圖 3.5 電子電洞復合時，所釋放的光子的平均能量大於產生電子電洞對所須吸收的能量。

<i>p</i> -Al _{0.25} Ga _{0.25} As,	100 nm, N _a =1e18
<i>p</i> -Al _{0.35} Ga _{0.65} As,	50 nm, N _a =1e18
<i>i</i> -Al _{0.25} Ga _{0.75} As,	50 nm
<i>i</i> -GaAs active layer,	100 nm
<i>i</i> -Al _{0.35} Ga _{0.65} As,	50 nm
<i>n</i> -Al _{0.35} Ga _{0.65} As,	50 nm, N _d =1e18
<i>n</i> -Al _{0.25} Ga _{0.25} As,	100 nm, N _d =1e18

圖 3.6 以 GaAs 為主動層且披覆層摻雜濃度高的電激發光二極體結構。

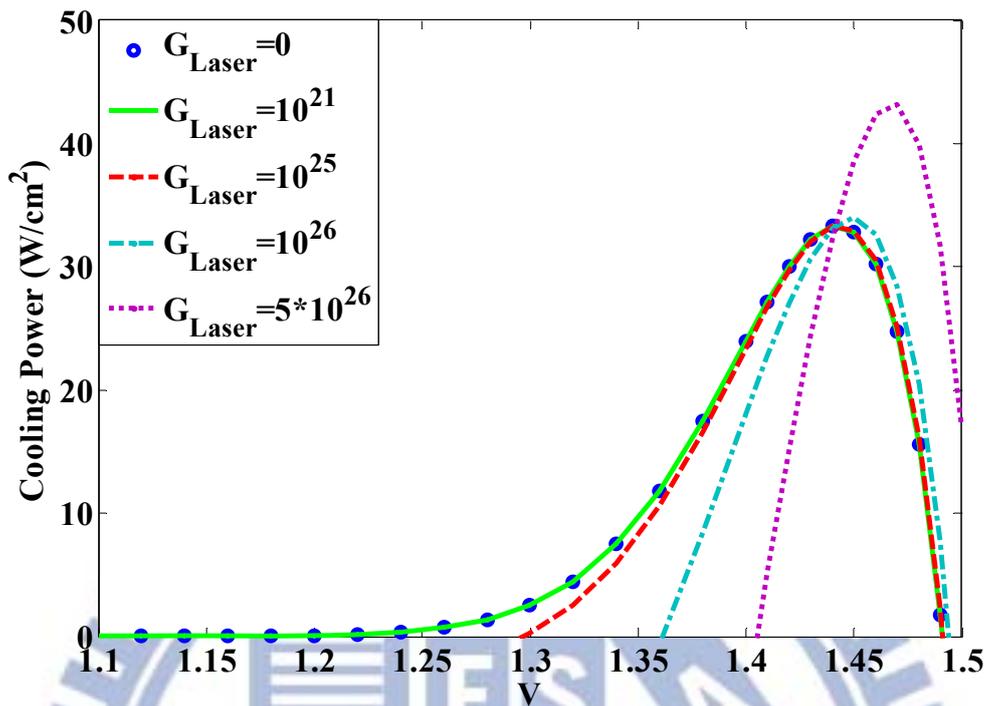


圖 3.7 在光萃取效率為 1，元件溫度 300 K 下，照射雷射光對元件的冷卻功率的影響。

圖 3.7 是在光萃取效率為 100% 的假設下探討照射雷射光是否可以提高冷卻功率。從圖中我們可以看出 G_{Laser} 小於 10^{26} 時，照射雷射光並不能有效提高冷卻功率。這是因為在不照射雷射光的情況下 ($G_{Laser} = 0$)，冷卻功率的峰值發生在偏壓為 1.44V 的時候，此時主動層的電子電洞對輻射復合率高達 4×10^{26} ，因此 G_{Laser} 小於 10^{26} 的話，對於提高冷卻功率的峰值是沒什麼幫助的。當 G_{Laser} 的值和 10^{26} 相當時，雷射光才有提高冷卻峰值的作用。在 G_{Laser} 高達 5×10^{26} 時，可以明顯看到冷卻峰值提高。

此外，在有雷射光照射時，冷卻峰值會稍微向高偏壓的方向偏移。這可以透過圖 3.8 來說明。由於此元件的載子注入效率 (Injection efficiency, η_{inj})，注入主

動層的載子數目與注入元件的載子總數的比值)與內部量子效率(Internal quantum efficiency, η_{IQE} , 主動層內輻射復合的電子電洞對數目與總復合的電子電洞對數目的比值)都趨近 1, 所以在此我們假設元件的載子注入效率與內部量子效率皆為 1 來討論, 亦即不考慮漏電流、蕭客萊-瑞德-霍爾復合與歐傑復合。圖 3.8 說明主動層區域中, 電子電洞對的注入、生成與復合的總合應為零。

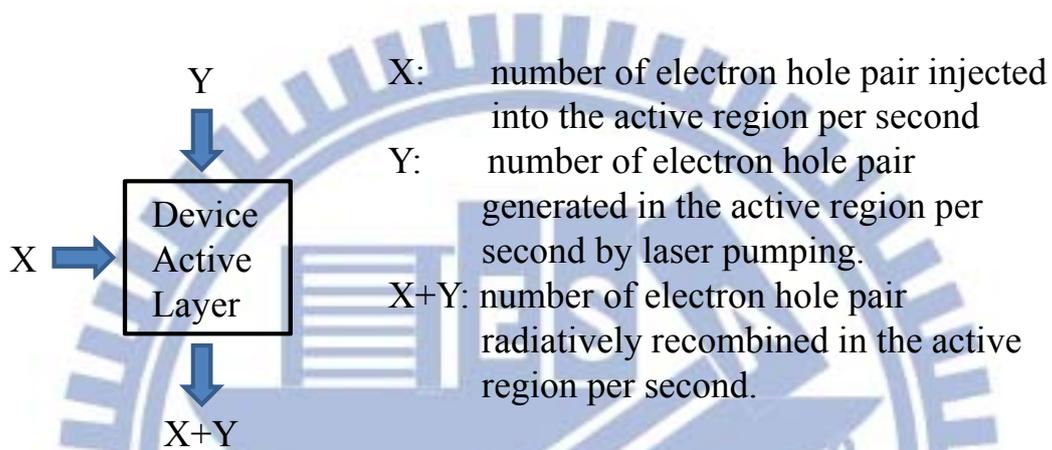


圖 3.8 載子注入效率、與內部量子效率皆為 1 時, 主動層載子守恆示意圖。

冷卻功率可以大概估算成:

$$P_{Cooling} = X(\langle \hbar\omega \rangle - qV) + Y(\langle \hbar\omega \rangle - E_g), \quad (3.5)$$

當 $V < E_g$ 時, $\langle \hbar\omega \rangle - qV$ 比 $\langle \hbar\omega \rangle - E_g$ 大, 此時元件的冷卻功率主要來自於注入的載子。照射雷射光會使得元件在低偏壓下有股逆電流, 使得在偏壓不大的區間裡, 照射雷射光反而使得冷卻功率降低。而在 $V > E_g$ 時, $\langle \hbar\omega \rangle - qV$ 比 $\langle \hbar\omega \rangle - E_g$ 小, 此時元件的冷卻功率主要來自於吸收雷射光後再復合的載子, 所以當 $V > E_g$ 時, 雷射光強度越強, 冷卻功率會越高, 使其冷卻功率的峰值向高偏壓的方向移動。

然而, 一般光激發光的致冷元件所使用的雷射光強度大約是 1 mW, 這大約對應到 $G_{Laser} = 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ 。從模擬結果看來, 雷射光強度須高達 100 W 才能有效

提升元件的冷卻功率，所以可以說在電激發光二極體上打雷射光對於提升其冷卻功率幫助不大。

圖 3.9顯示在有雷射光照射和沒有雷射光照射的情形下，不同的光萃取效率對冷卻功率的影響。光萃取效率越低，冷卻功率的峰值也越低。但由於光子循環效率高達 0.99(參考式(2.31)、表 3.2與表 3.3)，元件仍保有相當的冷卻功率。

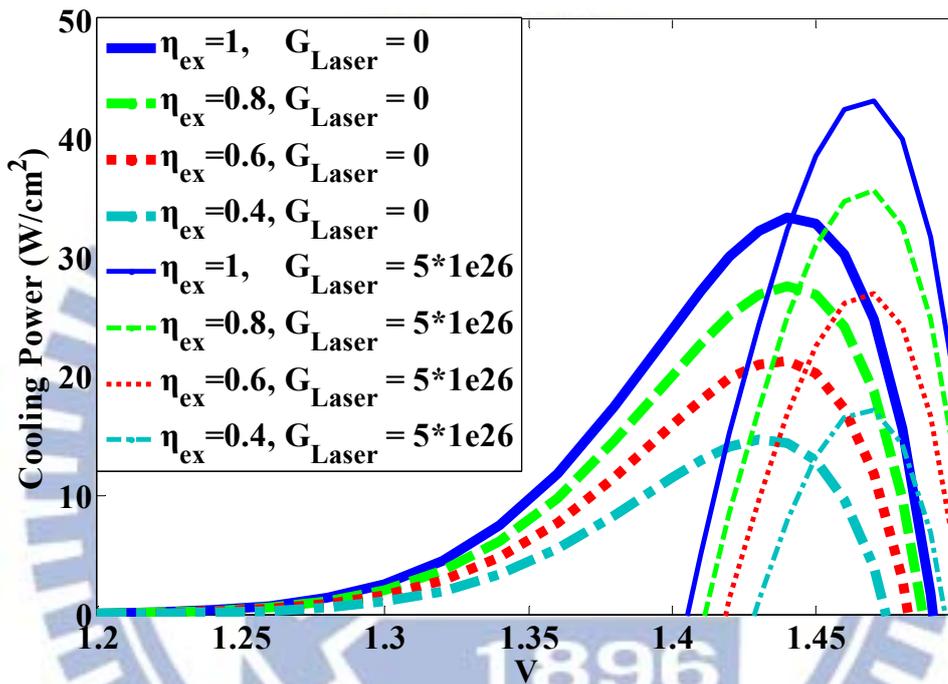


圖 3.9 元件溫度 300 K 下，光萃取效率對冷卻功率的影響。

3-4 電極接面阻抗

在前面的討論裡，我們都沒有把電極與元件的界面考慮進去。但實際上，在電極與元件的界面上也會有能量的損耗。電極接面阻抗(Contact resistance, ρ) 會使冷卻功率降低，甚至使元件喪失冷卻的效果。在這個章節中我們將討論在章節3-3中所討論的元件所能容忍的最大電極接面阻抗，亦即，多大的電極接面阻抗會使冷卻功率降至零。

首先，將冷卻功率修正為：

$$P'_{Cooling} = P_{Cooling} - P_{Contact} \quad , \quad (3.6)$$

電極接面阻抗所造成的功率損耗可以表示成：

$$P_{Contact} = J_C^2 \rho \quad , \quad (3.7)$$

其中 J_C 為通過電極的電流密度。

另外考慮通過元件的電流和通過電極的電流相等：

$$A_D J_D = A_C J_C \quad , \quad (3.8)$$

其中 J_D 為通過元件的電流密度，而 A_D 和 A_C 分別為元件和電極的截面積。

當電極所造成的功率損耗和元件本身的冷卻功率相當時，整體將不再有冷卻的效果 ($P'_{Cooling} \leq 0$)。此時的電極接觸大小為：

$$\rho_{\max} = \frac{P_{cooling}}{J_C^2} = P_{cooling} \left(\frac{A_C}{A_D J_D} \right)^2 \quad . \quad (3.9)$$

由此可見，電極和元件的截面積相等時，能容忍較大的電極接面阻抗。當電極截面積小於元件截面積時，其冷卻功率 $P'_{Cooling}$ 會因為電極接面阻抗而大打折扣。

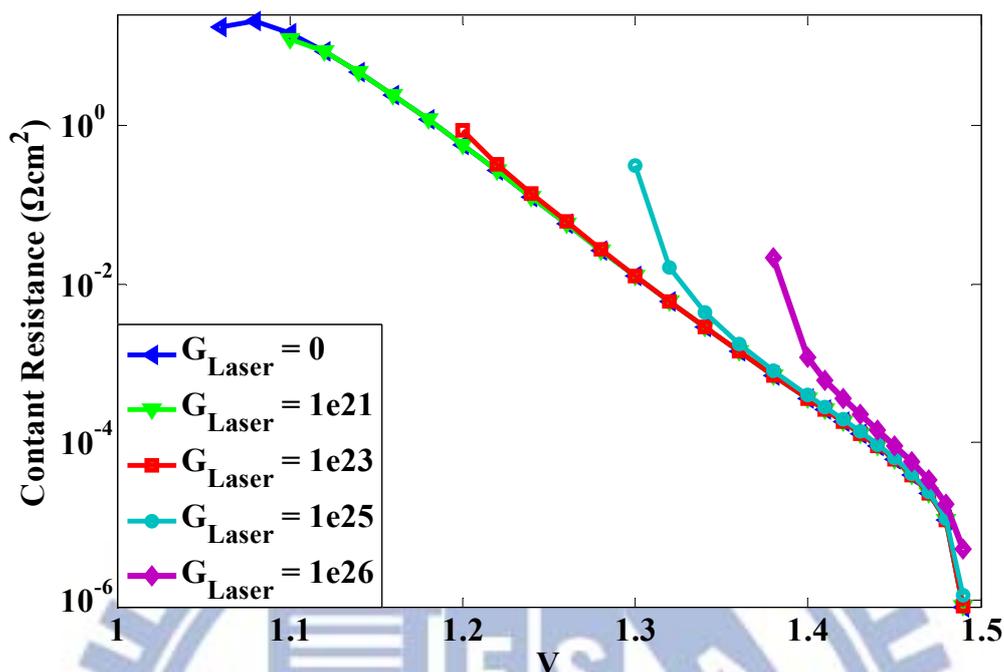


圖 3.10 偏壓、雷射光照強度與最大電極阻抗的關係。

圖 3.10 為章節 3-3 中，不同強度的雷射光入射下所能容忍的最大電極接觸面阻抗。從圖中可看出以下幾點：

- (1) 隨著偏壓增加，最大電極阻抗減小。這主要是電流隨著偏壓增加而增加所導致。
- (2) 雷射光強度越大，最大電極阻抗的峰值越低。在雷射光的照射下，元件要到較高的偏壓下冷卻功率才有可能為正。此時元件的電流也已隨著偏壓提升，所以最大電極阻抗的峰值會較低。
- (3) 最大電極阻抗的峰值發生在冷卻功率不高的偏壓下，而在冷卻功率達到峰值的偏壓下最大電極阻抗卻很低，如表 3.7。一般電極阻抗的數量級約為 10^{-6} 至 $10^{-7} \Omega\text{cm}^2$ [13]，而我們所計算出的冷卻功率達到峰值的偏壓下最大電極阻抗大於這個值。所以若把電極阻抗納入考慮，元件還是有正的冷卻功率，只是其值較低，且冷卻功率的峰值將往低偏壓的方向位移。

$G_{Laser} (cm^{-3}s^{-1})$	冷卻功率達到峰值時的偏壓(V)	最大電極阻抗(Ωcm^2)
0	1.44	$8.836 \cdot 10^{-5}$
10^{21}	1.44	$8.836 \cdot 10^{-5}$
10^{23}	1.44	$8.836 \cdot 10^{-5}$
10^{25}	1.45	$3.982 \cdot 10^{-5}$
10^{26}	1.48	$1.649 \cdot 10^{-5}$

表 3.7 不同光照強度下，冷卻功率達到峰值時的偏壓與其最大電極阻抗

3-5 熱傳導係數

能量在環境與元件間傳遞可以透過輻射，傳導(透過元件基板)與對流三種方式。在此我們假設元件被放置在一真空腔體中而不討論對流。在章節3-2與3-3的計算中，我們假設元件溫度和環境溫度一樣，都是 300 K。當 $P_{cooling}$ 大於零，元件降溫時，可以立刻從環境吸收能量，當 $P_{cooling}$ 小於零，元件升溫時，可以立刻把多出來的能量釋放到環境中。這相當於有一個無窮大的熱傳導係數 h ，使得元件可以維持定溫。

但實際上熱傳導係數不是無窮大，所以元件溫度會不同於環境溫度。這時候我們還需要把熱輻射的功率(2.39)考慮進來，並計算功率守恆的式子(2.36)。

熱傳導係數可以表示成：

$$h = \frac{\kappa}{L}, \quad (3.10)$$

其中 κ 是因材料而異的熱傳導率， L 可視為元件基板的厚度。基板越厚，熱傳導係數越小，表示其熱傳導越差，當元件溫度低於環境溫度時，可防止熱回灌。

本章節中將探討圖 3.6 的元件結構在正偏壓下的降溫能力。在此我們不考慮電極界面阻抗，也不考慮雷射光照射的情況。

3-5-1 熱傳導係數對元件最低溫度的影響

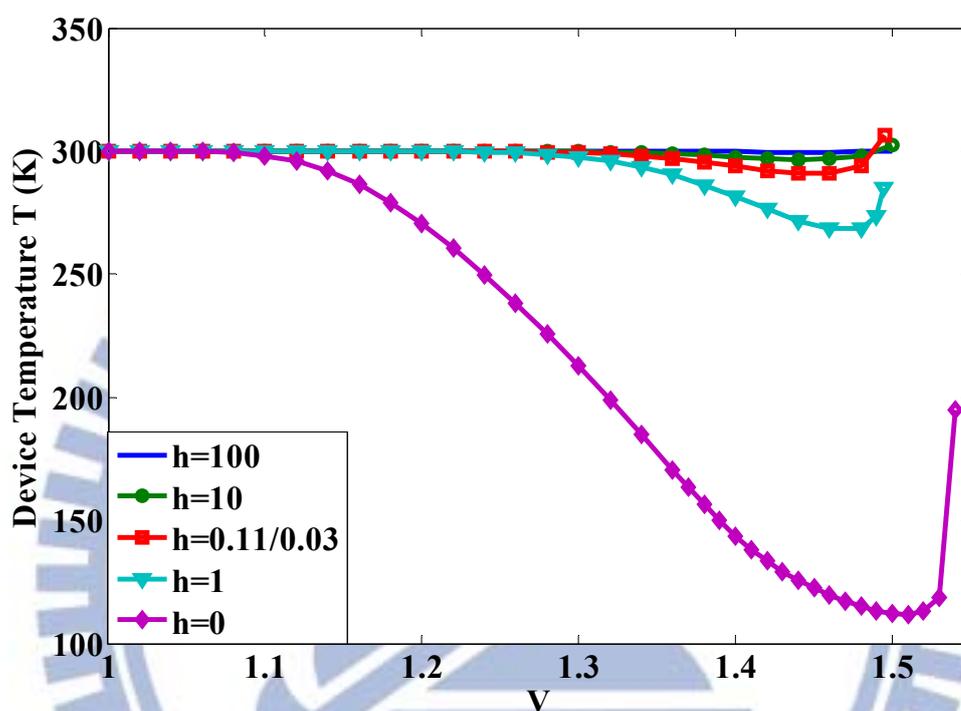


圖 3.11 在光萃取效率與輻射係數皆為 1，環境溫度 300 K 的狀況下，元件溫度的變化。當熱傳導被完全隔絕時元件可以到最低溫度 112 K。

圖 3.11 呈現了在不同傳導係數下元件可能達到的最低溫度。我們分成以下幾點來討論：

- (1) 當 h 值越小，代表熱傳導越差，此時環境溫度和元件溫度的差會比較大，如此才能使功率守恆。熱輻射功率因為斯特凡-波茲曼係數(見表 3.1)的關係，其值不大，在 300 K 的環境溫度下，元件即使降到了絕對零度，此時的熱輻射功率也只有 0.04 W/cm^2 左右。反觀熱傳導係數，其值的數量級約在 10^0 到 10^2 之間，舉例來說，假設能量透過一 $300 \mu\text{m}$ 的 GaAs 基板傳導，其傳導係數 h 約

為 3.7 W/Kcm^2 ，此時能量主要透過傳導的路徑來傳遞，熱輻射的影響非常小。在章節3-3的不照射雷射光的情況下，最大的冷卻功率約為 30 W/cm^2 左右。在傳導係數為 3.7 的狀況下，元件溫度無法下降多少。

- (2) 然而當傳導係數越來越小時，熱輻射的影響就越來越顯著了。此時為了從環境吸收能量以平衡其冷卻功率，元件就有機會達到更低的溫度。要注意的是，雖然元件溫度可以再降低，但溫度再低，由於小的傳導係數和熱輻射的限制，其傳導功率和熱輻射功率的合還是很小，亦即其冷卻功率勢必要下降。也就是說，當熱傳導係數越小時，元件的冷卻功率會越低。
- (3) 此外，圖 3.11 中的三角形的線雖然以 $300 \mu\text{m}$ 的 GaAs 基板作為熱傳導的媒介，但因為基板和主動層的材料相同，能隙也相同，主動層所釋放出的光子若走到基板將有可能被基板吸收，且在基板中被吸收的光子不像在主動層中被吸收的光子一樣可以透過光子循環效應再次放光。我們的計算並沒有考慮光子在基板被吸收的情形，所以實際上的冷卻功率會比模擬結果低，最低溫度也會比圖 3.11 中 $h=3.7$ 的曲線的最高溫度。
- (4) 比對圖 3.9 中的 $G_{\text{Laser}}=0$ ， $\eta_{\text{ex}}=1$ 曲線與圖 3.11 中 $h=0$ 的曲線，會發現在 300 K 定溫的計算下，在 1.5 V 時，冷卻功率已經變成負值，然而在考慮溫度變化的計算下，在 1.5 V 下元件溫度小於 300 K ，冷卻功率為正值。當熱傳導係數越小時，使元件達到最低溫的偏壓會越高。這是因為當熱傳導係數小時，元件可以降到比較低的溫度，而在低溫下，主動層的能隙較大，平均光子能量也較高，使得 $V > \langle \hbar\omega \rangle$ 的偏壓點向高偏壓方向移動。 $V > \langle \hbar\omega \rangle$ 的偏壓點約為冷卻功率達到峰值時的偏壓點，也就是元件溫度最低時的偏壓點。
- (5) 為了探討元件可能的最低溫度，我們也在 $h=0$ 的條件下作計算。 $h=0$ 即假設沒有熱傳導的理想狀況，熱輻射是環境和元件間能量傳遞的唯一路徑。此時元件的最低溫度為 112 K 。

3-5-2 元件溫度的雙重解

考慮熱輻射時，除了泊松方程式與電子電洞連續方程式等三條方程式外，必須把描述功率守恆的方程式也加入自洽運算中，來求得特定偏壓下的元件溫度。但我們也可以先在固定偏壓下不同的元件溫度下作不考慮熱傳導的計算，並記錄其冷卻功率值，畫出一條固定偏壓下，冷卻功率隨元件溫度變化的曲線。然後再根據式(2.39)畫出一條環境溫度 300 K 下，熱輻射功率對元件溫度變化的曲線。這兩條曲線相交處的元件溫度即為環境溫度 300 K、在某特定偏壓下，只考慮熱輻射而不考慮熱傳導的元件溫度解，如圖 3.12。

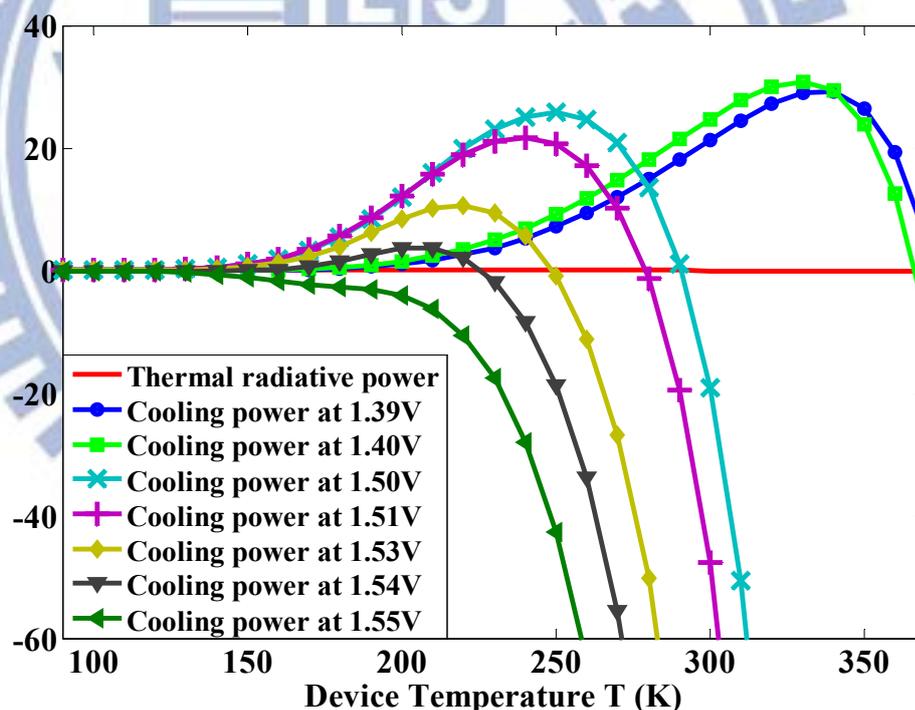


圖 3.12 在不考慮環境能量流入元件的情況下，元件在不同偏壓與不同溫度下的冷卻功率。圖中曲線與熱輻射冷卻功率曲線的交點的溫度為只考慮熱輻射時，固定偏壓與環境溫度(300 K)下的元件溫度解。

從圖 3.12可以看出，元件溫度有兩個解。在低偏壓下，環境溫度為 300 K 時，有一個升溫解和一個降溫解。在高偏壓下，兩個解都是降溫解。當偏壓再增加時兩個低溫解會越來越靠近，最後變成沒有解。此時功率守恆無法達成，元件的冷卻功率為負值($JV > P_{\text{Emission}}$)，吸收的能量無法排出，所以溫度會升高，但溫度越高冷卻功率卻越低，元件只能不斷升溫，最終燒毀。這是圖 3.11 中 $h = 0$ 和 $h = 1$ 的曲線無法畫出元件升溫超過 300 K 的部分的原因。

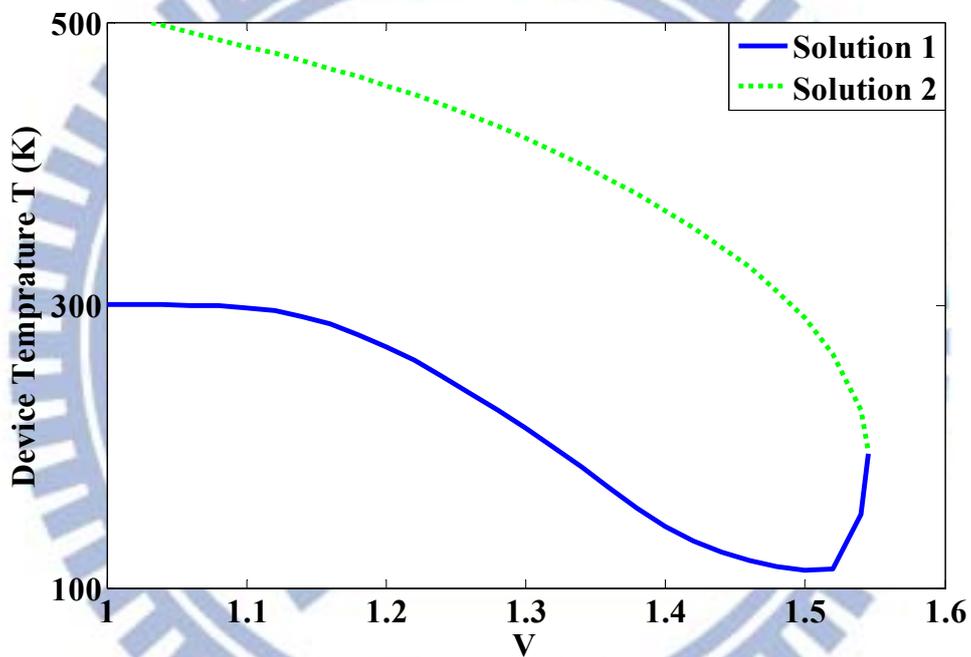


圖 3.13 固定環境溫度與偏壓下的雙重解。

圖 3.13 中把兩個元件溫度解都畫了出來。在元件從元件溫度從和環境溫度相同的狀態下，慢慢將偏壓由 0 V 往上加的操作方式下，元件溫度偏壓的變化會是第一組解(實線)。

第二組解(粗虛線)在低偏壓時溫度越高，且在電壓逐漸逼近零時，第二個解的元件溫度會不斷升高，甚至超過 GaAs 的熔點。以下將討論幾種操作方式來說

明這是一組不合理的解。由於用圖 3.12 無法清楚的解釋，所以另外用圖 3.14，以較誇張的表示法來說明。

- (1) 如圖 3.14，當元件的初始狀態(點A)在第一組解上，改變偏壓。若改變偏壓造成冷卻功率提升(在 $V < 1.51$ 時增加偏壓，如圖 3.14 (a)，或是在 $V > 1.51$ 時降低偏壓，如圖 3.14 (b))，使冷卻功率大於熱輻射功率(點B)，則元件溫度下降，直到找到這個偏壓下位於實線上的解(點C)。反之，若改變偏壓造成冷卻功率下降(在 $V < 1.51$ 時降低偏壓，如圖 3.14 (c)，或是在 $V > 1.51$ 時增加偏壓，如圖 3.14 (d))，使得冷卻功率小於熱輻射功率(點B)，則元件溫度上升，直到找到這個偏壓下位於實線上的解(點C)。

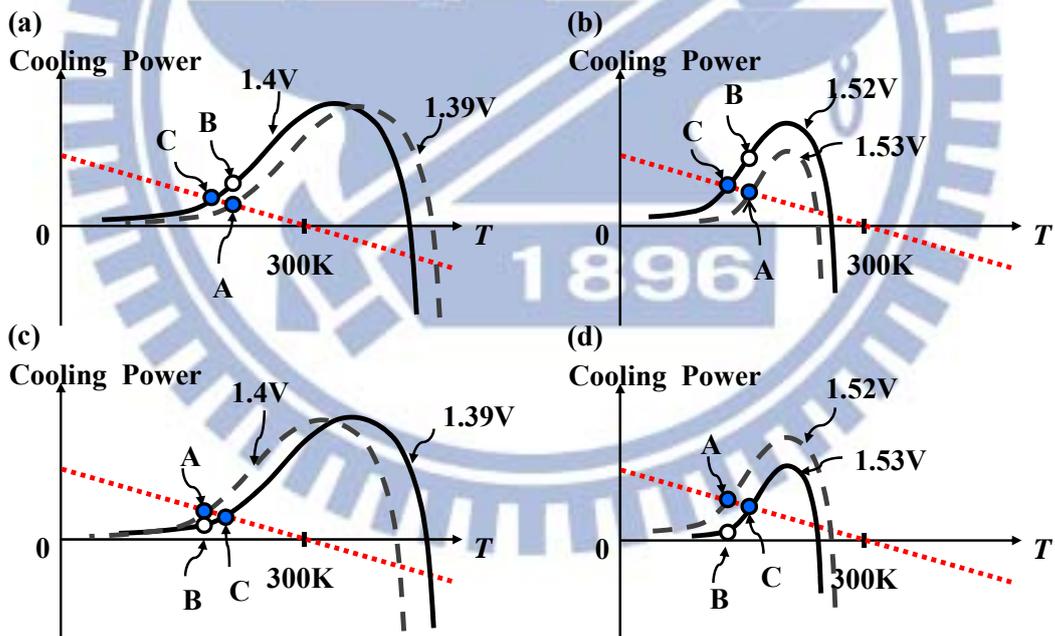


圖 3.14 固定環境溫度，改變偏壓時，元件溫度變化趨勢示意圖，圖中點線為熱輻射功率。

(2) 當元件的初始狀態(點A)在第一組解上，改變環境溫度。如圖 3.15 (a)，當環境溫度提高使得熱輻射功率提高，則元件溫度提高，直到找到實線上的解(點B)。當環境溫度下降如圖 3.15 (b)，使得熱輻射功率降低，則元件溫度降低，直到找到實線上的解(點B)。

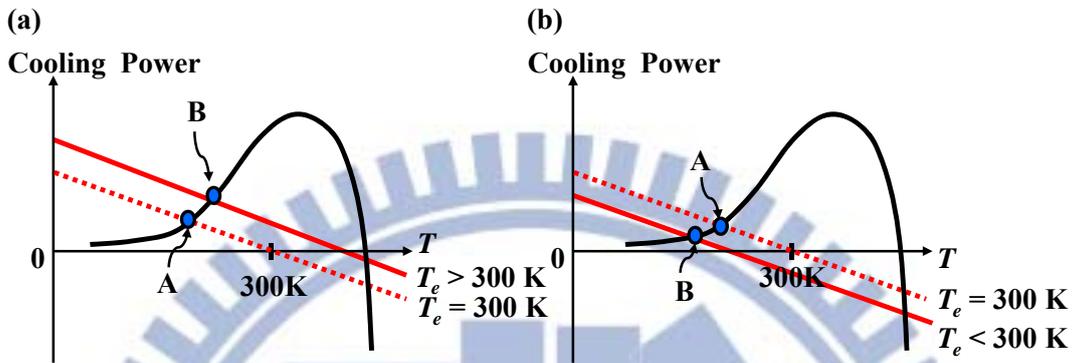


圖 3.15 固定偏壓，改變環境溫度時，元件溫度變化趨勢示意圖，圖中兩條斜線為不同環境溫度下的熱輻射功率。

(3) 即使我們讓元件從沒有外加偏壓的狀況下直接通上適當的偏壓使其冷卻功率為零(例:在環境溫度 300 K 下外加 1.49 V 的偏壓)，如圖 3.16 點A，元件在圖 3.13 中的第二組解上(虛線與 $T=300 K$ 相交處)，只要稍微提高偏壓如圖 3.16 (a) 點B，冷卻功率為負且熱輻射功率太小無法達到平衡狀態，元件會不斷升溫直到燒毀。若稍微降低偏壓，如圖 3.16 (b) 點B，冷卻功率為正，元件降溫，最終會走到圖 3.13 中的第一組解上(圖 3.16 (b) 點C)。

若是維持偏壓而改變環境溫度，當提高環境溫度時，熱輻射功率增加，元件將升溫，升溫後冷卻效率會從零變成負的(如圖 3.16 (c) 點B)，元件將不斷吸熱，最後燒毀。若是降低環境溫度，元件會透過熱輻射將能量傳遞到環境中，元件將降溫，降溫後冷卻效率為正，使得元件持續降溫直至圖 3.16 (d) 上的點B。此為圖 3.13 中的第一組解。

不論是偏壓還是環境溫度，其值都會有些微的波動。若元件的初始狀態

在圖 3.13 中的第二組解(虛線)上，只要偏壓或是環境溫度稍微改變元件就會跑到第一個穩態解上或是燒毀，因此第二個解在實際上不存在。

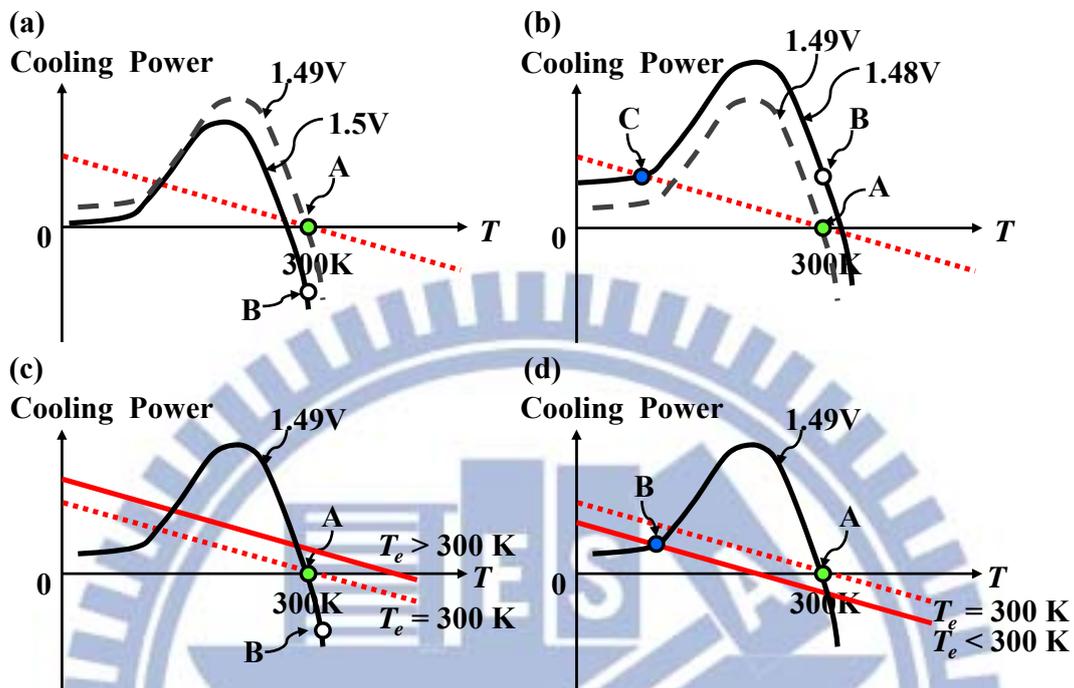


圖 3.16 元件溫度等於環境溫度 300 K，直接通上使元件冷卻功率為零的偏壓後，稍微改變偏壓所造成的元件溫度變化趨勢，其中點線為熱輻射功率。

由(1)-(3)的討論中我們可以歸納出，在圖 3.12 上看到的數值解，若其左邊(溫度較低)熱輻射功率大於冷卻效率，其右邊(溫度較高)熱輻射功率小於冷卻效率，則這是一個穩態解(圖 3.13 上的實線)，如(1)與(2)的討論。反之則為一非穩態解(圖 3.13 上的虛線)，現實中元件無法達到這個狀態。

(4) 最後我們將討論把熱傳導也考慮進來的情形。由於熱傳導係數遠大於熱輻射斯特凡-波茲曼係數，所以圖 3.14 至圖 3.16 上的點線的斜率會更大，如圖 3.17 (a)。當熱輻射係數增加，點線變陡時，各偏壓下的第一個解(點 A、B、D)會向高溫處移動。元件在 1.5 V 下時其冷卻功率曲線與熱輻射功率只有一個交點 A。按照由(1)至(3)歸納出來的判別法則，當元件初始溫度比 A 點低時，會變化到 A 點的溫度上，但若其初始溫度大於 A 點溫度，

則元件會不斷升溫終致燒毀。所以A點不能看作是一個穩態解。而當元件在 1.49 V與 1.4 V下時，當元件初始溫度分別小於點C、E溫度時，其溫度會分別變化到點B、D的溫度。當元件初始溫度分別大於點C、E溫度時，元件會升溫燒毀。點B、D是穩態解，而點C、E是不合理的解。當熱輻射係數再增加，如圖 3.17 (b)，此時元件在 1.5 V下沒有解，會燒毀。而當元件在 1.49 V與 1.4 V下時，點B、D是穩態解，而點C、E是不合理的解(E點的冷卻功率是很大的負值，故未畫出)。當熱輻射係數大到可使元件維持和環境溫度相同(300 K)，如圖 3.17 (c)，在每個偏壓下都只有一個解，而且這個解是穩態解。這就和一般在固定環境溫度下的計算是一樣的。



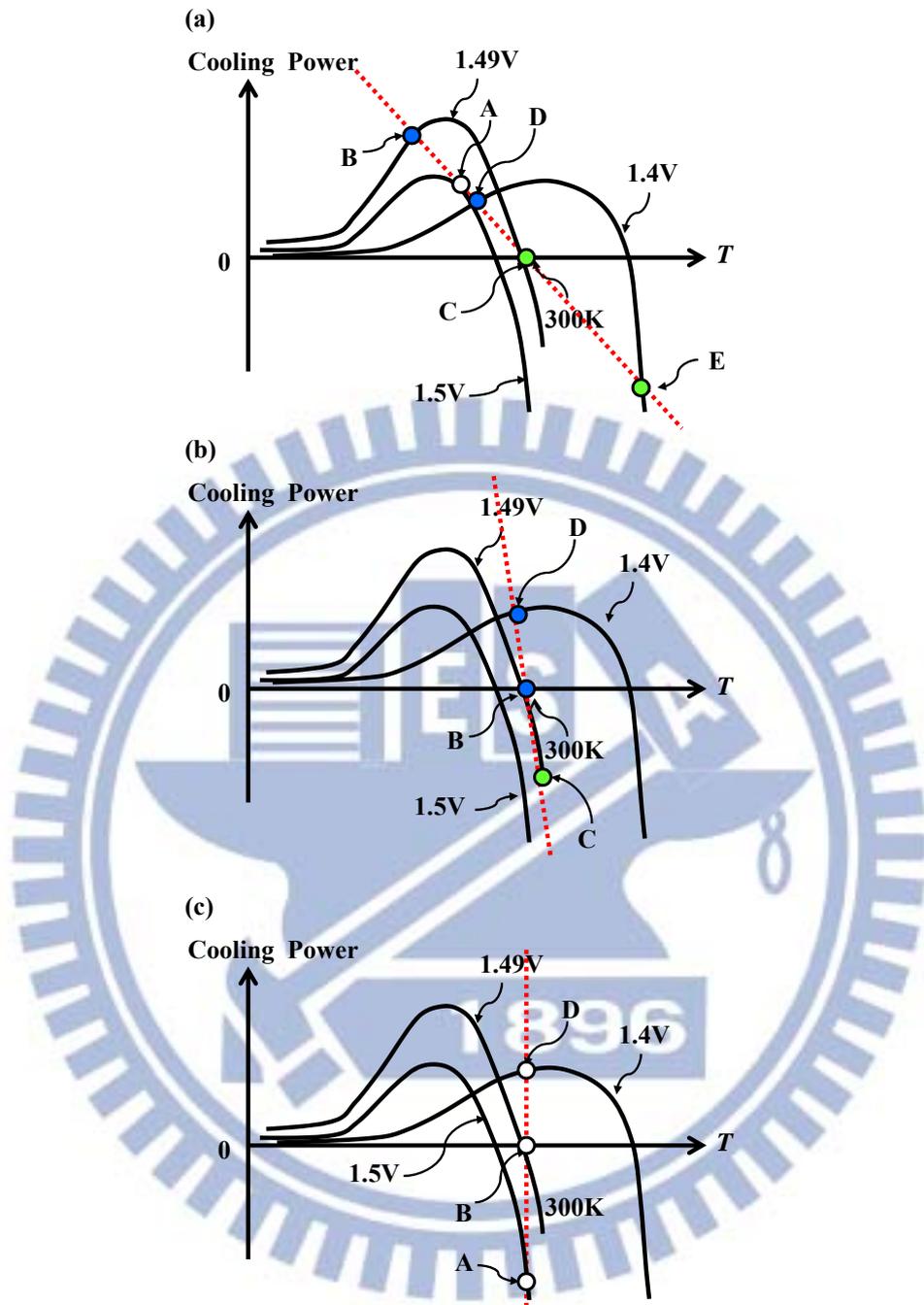


圖 3.17 考慮不同熱傳導係數時，元件穩態的分析圖。

3-5-3 主動層長度對元件溫度的影響

在元件溫度與環境溫度相等的假設下，主動層越長，冷卻功率越高，大約在主動層長度為 5 微米時，可以達到最高的冷卻功率[7]。若增加主動層能提升冷卻功率，那麼為了達到功率守恆，冷卻功率越高，元件溫度理當越低。但只考慮熱輻射而不考慮熱傳導的模擬結果如圖 3.18 所顯示，加長主動層長度反而使元件溫度稍微提升了。另外，主動層長度越長，使元件達到最低溫的偏壓點越低。這和參考文獻[7]的結果是一致的。參考文獻[7]中提及，在低偏壓下，主動層較長的元件的注入電流較大，所以冷卻功率較大。然而在高偏壓下，主動層較長的元件主動層中載子濃度較低，使得其冷卻功率降低。

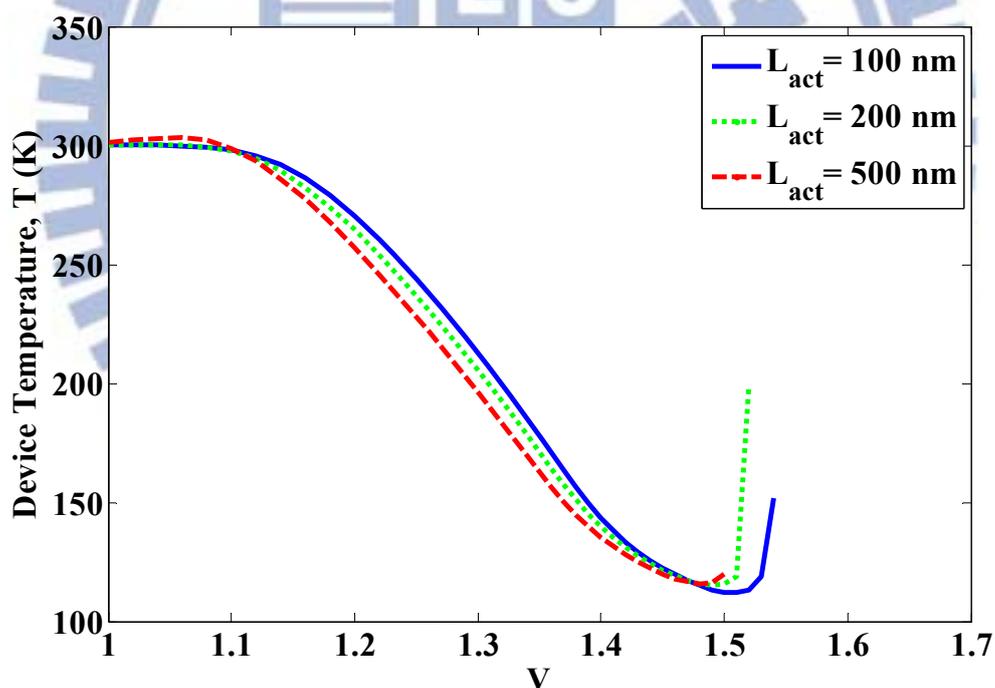


圖 3.18 元件主動層長度對降溫極限的影響。

由於參考文獻[7]是用元件溫度等於環境溫度 300 K 的假設下模擬出來的結果，而我們的模擬中，元件達到冷卻功率峰值時(即元件溫度達到最低點)的元

件溫度不是 300 K，所以我們以圖 3.19與圖 3.20來驗證在不同元件溫度下，主動層長度與冷卻功率的關係趨勢是否和在假設元件溫度為 300 K下的一樣。圖 3.19與圖 3.20分別畫了在低偏壓(1.2 V)與高偏壓(1.5 V)下，不同主動層長度的元件的冷卻功率對元件溫度的關係曲線。它們和熱輻射曲線的交點，即為考慮環境溫度為 300 K且只考慮熱輻射不考慮熱傳導下的元件溫度解。

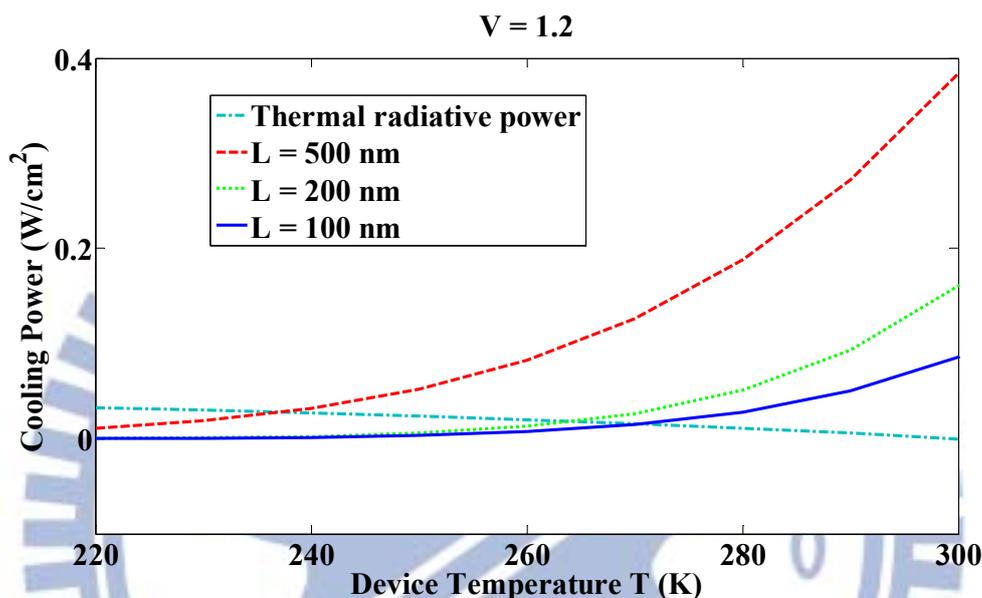


圖 3.19 低偏壓(1.2 V)下，在假設環境溫度等同於元件溫度的假設下，不同主動層長度的元件的冷卻功率對元件溫度的關係曲線。它們和熱輻射曲線的交點，即為考慮環境溫度為 300 K 且只考慮熱輻射不考慮熱傳導下的元件溫度解。

從圖 3.19中我們可以看出，在低偏壓下，假設元件溫度為定溫時，主動層長度越長，冷卻功率越高。我們可以看出，主動層越長的元件的冷卻功率曲線會和熱輻射的曲線交在越低溫處。所以低偏壓下主動層越長，元件溫度越低。

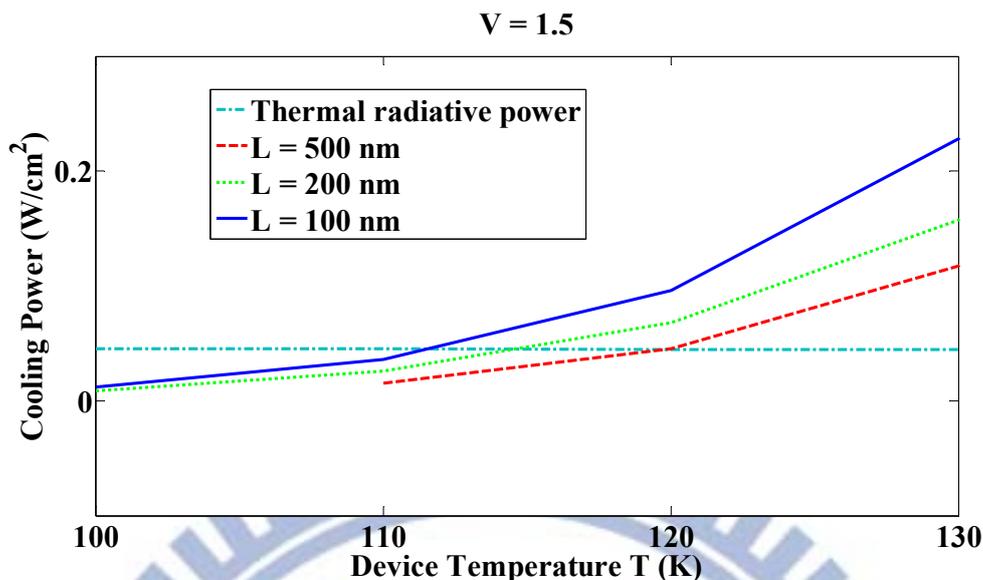


圖 3.20 高偏壓(1.5 V)下，在假設環境溫度等同於元件溫度的假設下，不同主動層長度的元件的冷卻功率對元件溫度的關係曲線。它們和熱輻射曲線的交點，即為考慮環境溫度為 300 K 且只考慮熱輻射不考慮熱傳導下的元件溫度解。

從圖 3.20 中我們可以看出，在高偏壓下，假設元件溫度為定溫時，主動層長度越長，冷卻功率越低。主動層越長的元件的冷卻功率曲線會和熱輻射的曲線交在越高溫處。所以高偏壓下主動層越長，元件溫度會越高。

由於元件最低溫度並沒有因為主動層長度而有太大的差異，因此，我們推論電激發光冷卻元件的降溫極限主要受限於材料本質。

章節3-5討論都是建立在光萃取效率與元件表面之熱輻射之輻射係數均為 1 的假設下的。以下我們將討論光萃取效率與輻射係數對元件最低溫的影響。

從圖 3.21 中我們發現，低偏壓下光萃取效率降低會使元件溫度降溫幅度減低，然而超過 1.5 V 時，光萃取效率降低反而使元件溫度更低，且元件溫度的極值發生在更高的偏壓下。在光萃取效率為 0.4 時，元件可到達的最低溫為 109 K。

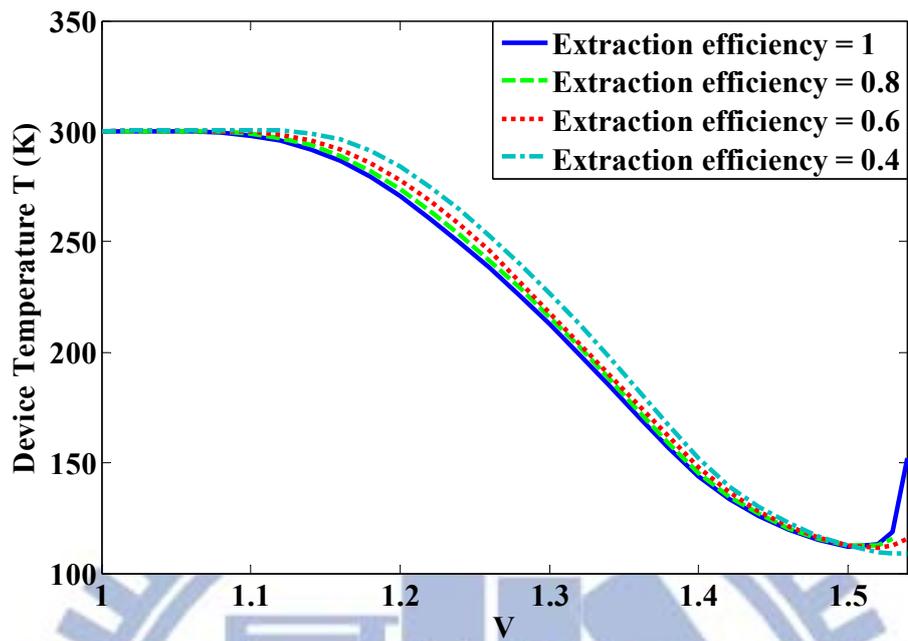


圖 3.21 光萃取效率對元件降溫極限的影響。

從圖 3.22 中可以看出，當輻射係數越小時，溫度的變化量就必須增加，以維持功率守恆，因此輻射係數低時，元件的最低溫可以再降更低一些。在輻射係數為 0.4 時，元件可到達最低溫度 103.5 K。

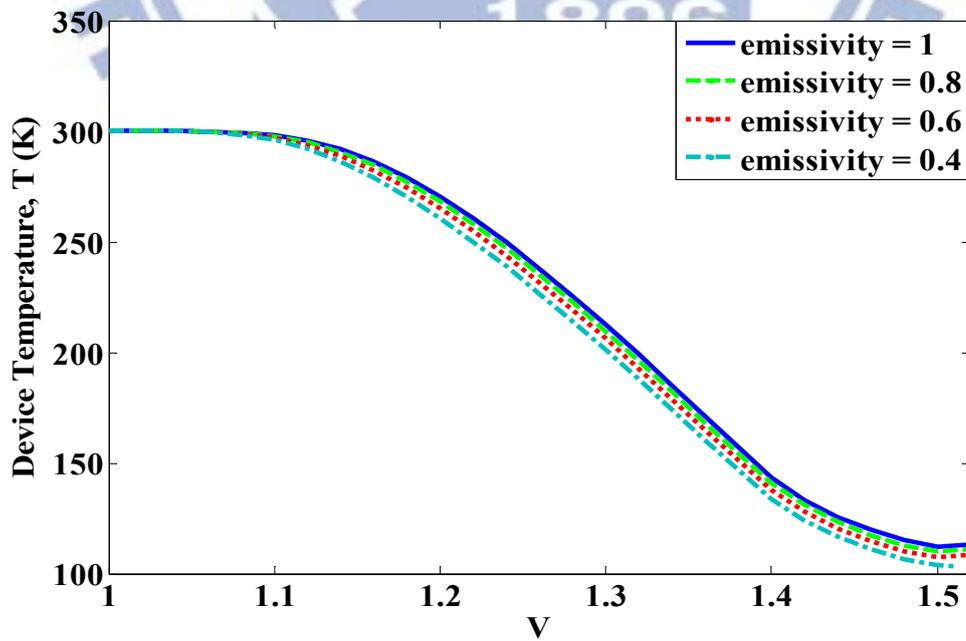


圖 3.22 輻射係數對元件降溫極限的影響。

3-5-4 GaInP/InP/InGaAs元件的降溫特性

前面的章節中我們討論了以GaAs作為主動層，AlGaAs作為披覆層(Cladding layer)與電流阻擋層(Current blocking layer)的元件，在本章節中我們將討論以In_{0.53}Ga_{0.47}As作為主動層，InP作為披覆層，GaInP作為電流阻擋層的元件，如圖 3.23。以InGaAs作為主動層，其所放出的光子大約可以對應到通訊用的 1.55 μm波段。而使用此元件的特色在於第一、InP的能隙較主動層來的大，不易吸光，有機會克服實作上光萃取效率過低的問題。第二、主動層和基板晶格匹配，因此主動層厚度沒有限制，有機會成長厚膜而提高冷卻功率。

<i>p</i> -InP,	100 nm, N _a =1e18
<i>p</i> -Ga _{0.1} In _{0.9} P,	50 nm, N _a =1e18
<i>i</i> -InP,	50 nm
<i>i</i> -In _{0.53} Ga _{0.47} As,	100 nm, active layer
<i>i</i> -InP,	50 nm
<i>n</i> -Ga _{0.1} In _{0.9} P,	50 nm, N _d =1e18
<i>n</i> -InP,	100 nm, N _d =1e18

圖 3.23 以 In_{0.53}Ga_{0.47}As 為主動層的電激發光二極體結構。

異質界面方面，In_{0.53}Ga_{0.47}As和InP的晶格大小是相等的，不會有很多缺陷而造成很大的蕭客萊-瑞德-霍爾復合率。雖然InP與電流阻擋層之Ga_{0.1}In_{0.9}P的晶格大小不同，但Ga的量在 15%時其臨界厚度為 150 奈米[14]，所以仍然可以視為一個好的介面。

然而，因為主動層材料In_{0.53}Ga_{0.47}As的歐傑係數過大($C \approx 10^{28} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$)[15]，在假設元件溫度為 300 K定溫時，其最大冷卻功率只有 0.14 W/cm²，如圖 3.24。在加上InP基板的熱傳導係數較大($\kappa=0.68 \text{ W/Kcm}^2$ ，基板厚度 L_{sub} 設為 0.03 cm，

$h = \kappa/L_{\text{sub}} = 22.7 \text{ W/Kcm}$)，使得其降溫幅度不超 0.1 K，如圖 3.25。即使是不考慮熱傳導去模擬 $h=0$ 的理想狀況，溫度也只能下降到 210 K 左右，如圖 3.26。

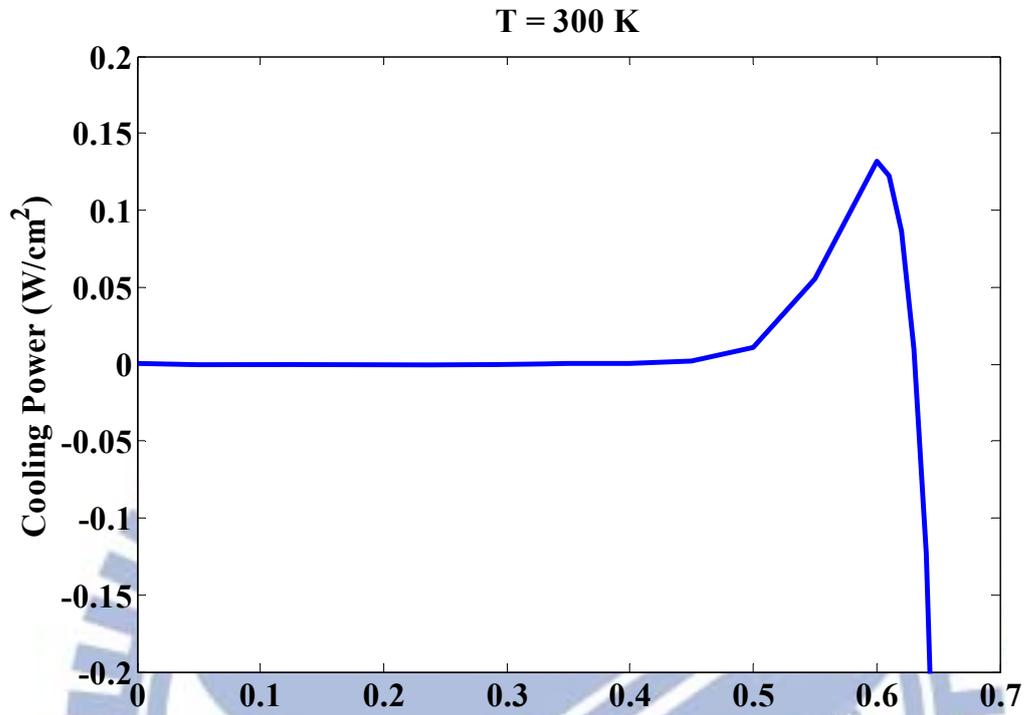


圖 3.24 假設元件溫度等於環境溫度 300 K 時，冷卻功率對外加偏壓的關係

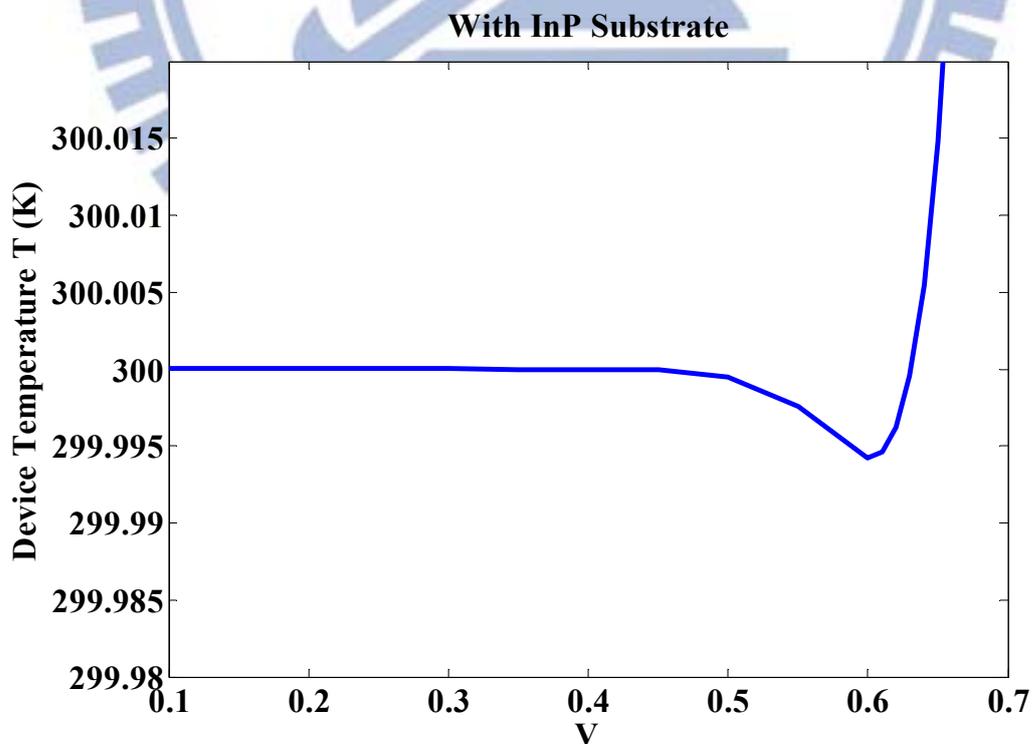


圖 3.25 假設熱傳導係數為 22.7 W/Kcm 時，元件(如圖 3.23 的)降溫極限。

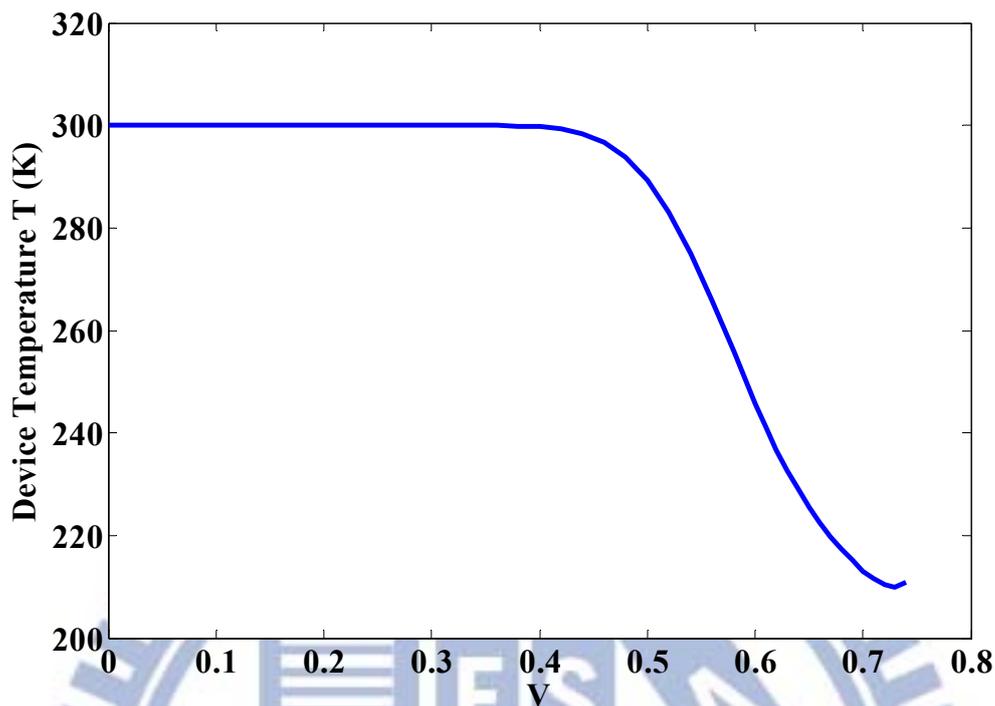


圖 3.26 假設熱傳導係數為 0 W/Kcm時，元件如圖 3.23 的降溫極限。

3-6 環境溫度對元件降溫極限的影響

章節3-5-1探討了室溫(300 K)下，不同熱傳導係數對元件降溫的影響，並在沒有熱傳導，單純考慮熱輻射的理想條件假設下模擬，以得知元件降溫的極限。這裡我們將討論在只考慮熱輻射的理想條件假設下，不同環境溫度對元件降溫極限的影響。元件結構如圖 3.6。如圖 3.27、圖 3.28所示，環境溫度越低，元件所能達到的最低溫度越低。環境溫度越高，雖然元件溫度下降較多，但其最低溫極限值較高。

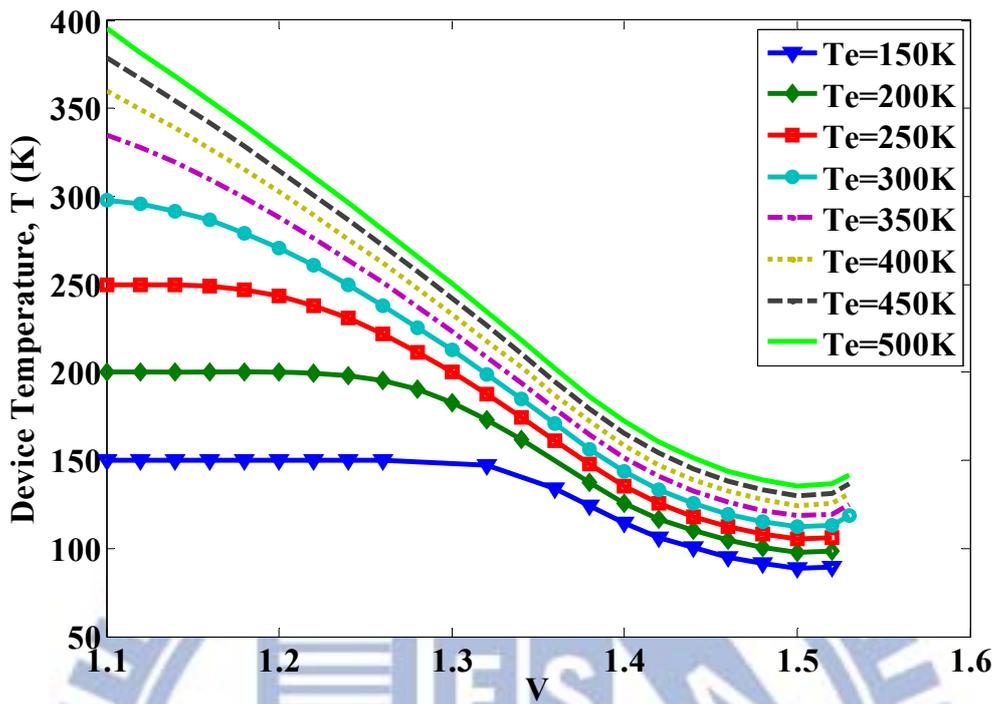


圖 3.27 假設在熱傳導係數為零時，元件在不同環境溫度與偏壓下的溫度。

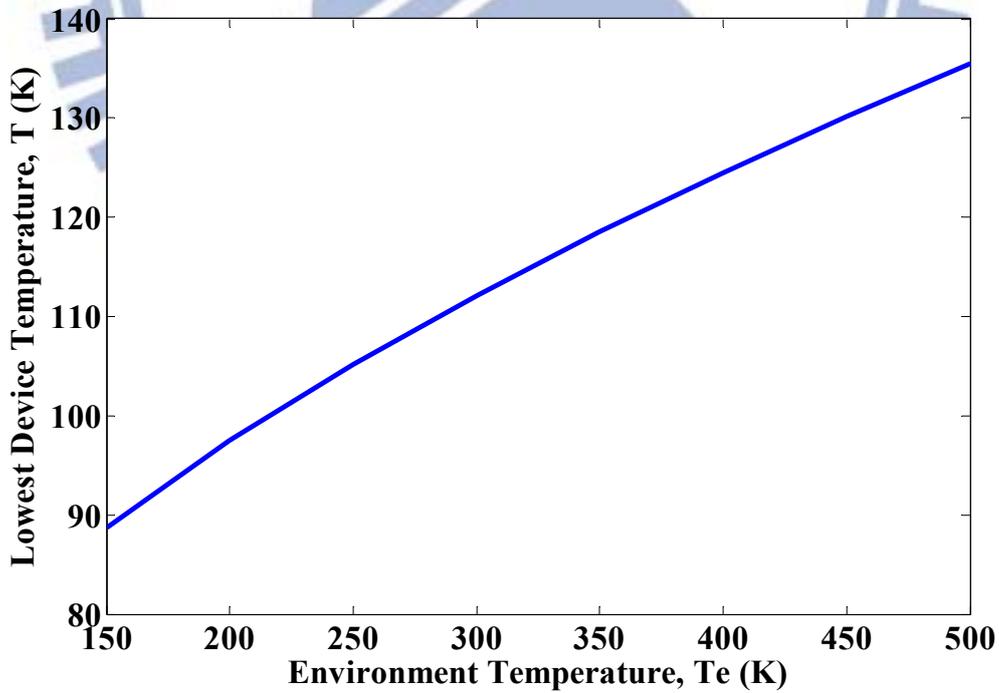


圖 3.28 假設在熱傳導係數為零時，不同環境溫度對降溫極限的影響。

第四章 結論

在本篇碩論中，我們以數值模擬的方式研究電激發光致冷元件的降溫極限並探討了其逆偏操作的可行性、接面電阻的影響與雷射輔助激發的結果。本論文中所用來討論的七層結構在逆偏壓下，由於電流過低，其冷卻功率趨近於零。在順偏壓下，照射雷射光對元件冷卻功率的提升影響不大。在雷射光強度夠強時 ($G_{Laser} > 10^{26} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$)，才能稍微提升冷卻功率，並使冷卻功率的峰值向高偏壓移動，因此並不適合應用於實驗上。在電極接面阻抗的部分，我們發現在不同操作偏壓下，可容許的電極接面阻抗存在一最大值，外加偏壓越高，可容許的電極接面阻抗越小，過大的接面阻抗將會使得元件由失去冷卻的功能而轉為發熱。

我們研究了兩種不同主動層材料的降溫極限，並且研究了熱傳導係數、環境溫度、主動層長度、光萃取效率和熱輻射之輻射率對降溫極限的影響。我們發現在只考慮熱輻射與熱傳導的狀況下，由於真實的熱傳導係數遠大於斯特凡-波茲曼係數，所以元件和環境的溫度差不會太大。然而在只考慮熱輻射的理想狀態下，當環境溫度為室溫時，以GaAs為主動層之元件的溫度極限為 112 K，而以 $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ 為主動層元件的溫度極限為 210 K，這是和先前的研究是有著很大的差異[5]。我們也發現當元件的光子循環效率趨近於 1 時，主動層長度和光萃取效率對降溫極限並沒有顯著的改變，而降低元件表面的輻射率，可以把降溫極限往更低溫些微推進。

目前為止，半導體元件降溫的現象尚未經由實驗被觀察到[3、4]。本論文的模擬建立在熱輻射發射率以及光萃取效率均為 1，並且不考慮熱對流以及熱傳導的理想假設下。因此，若要透過實驗觀察到半導體電激發光致冷元件的降溫，則必須適當的阻隔熱對流以及熱傳導的途徑，並要注意元件電極的設計使得元件有比較高的光萃取效率。如此將有機會觀察到半導體電激發光致冷元件的降溫現象。

參考文獻

- [1] M. R. Karmas *et al.*, *J. Display Technol.*, **3**, 160(2007)
- [2] D. V. Seletskiy *et al.*, *Nat. Photonics*, **4**, 161 (2010).
- [3] M. Sheik-Bahae and R. I. Epstein, *Nat. Photonics*, **1**, 639 (2007)
- [4] M. Sheik-Bahae and R. I. Epstein, *Laser Photonics Rev.*, **3**, 67 (2009).
- [5] G. Rupper *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 117401(2006)
- [6] S. L. Chuang , *Physics of Optoelectronic Devices*, (1995)
- [7] S. T. Yen, and K. C. Lee, *J. Appl. Phys.*, **107**, 54513 (2010)
- [8] M. Sez, and Kwok K. NG, *Physics of Semiconductor Devices*, (2007)
- [9] M. D. Ulrich *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **90**, 1625(2001)
- [10] K. Yang *et al.*, *Solid-State Electronics*, **36**, 321(1993)
- [11] A. Schenk, and G. Heiser, *J. Appl. Phys.*, **81**, 7900 (1997)
- [12] K. Horio, and H. Yanai, *IEEE Trans. Electron. Devices*, **37**, 1903(1990)
- [13] T. V. Blank *et al.*, *Semiconductors*, **41**, 1263(2007)
- [14] K. C. Lin *et al.*, *IEEE Transactions on Electron Devices*, **40**, 2361 (1993)
- [15] S. Hausser *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **56**, 913, (1989)

簡歷

姓名：林芳如

出生日期：76年8月6日

學歷：國立交通大學電子工程學系 (94.9~98.6)

國立交通大學電子所固態組 (98.9~100.10)

信箱：snowyowl1987@gmail.com

