学科前沿

基于缺陷工程提升光电器件发光效率†

黄　森

（中国科学院微电子研究所，北京 100029）

Enhancing the luminous efficiency of optoelectronic devices through defect engineering

HUANG Sen

(Institute of Microelectronics of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

注入效率和辐射复合效率是决定发光二极管（light-emitting diode, LED）量子效率的重要因素。在氮化镓基 LED 器件中，普遍存在载流子非对称注入问题，即电子冷却时间远长于空穴，导致大量注入电子无法在有源区发生有效辐射复合便泄漏至 p 型层。这是因为注入的载流子需先冷却至带边才能实现辐射复合。针对此问题的常用解决办法是引入电子阻挡层以缓解热电子泄漏，但会伴随工艺复杂度增加、空穴输运受抑制等问题。基于此，中国科学院长春光学精密机械与物理研究所石芝铭研究员、孙晓娟研究员、黎大兵研究员团队联合宁波东方理工大学魏苏淮教授等，报道了一项突破性理论成果[1]，通过精准引入氮空位（nitrogen vacancy, VN）缺陷，将热电子弛豫时间缩短至与空穴相同量级，有望显著提升 GaN 基 LED 的光电转换效率。

研究指出，在有源区 GaN/AlN 量子阱中，GaN 层的导带底（conduction band minimum, CBM）上存在一段能量宽度为 1.2 eV 的低态密度区域（图 1，位于 CBM 与 CBM+1 之间，记为 Eg2），导致从高能级注入的热电子在有源区内的弛豫时间长达 8.6 ps，而注入的空穴冷却至价带顶仅需不到 0.8 ps。因此，大量注入电子未进行辐射复合便漂移出有源区。通过在 AlN 势垒层特定位置引入 VN，可在 Eg2 区域内形成缺陷态。这些缺陷态不仅可作为能带准连续化的“台阶”（图 1），还可通过增强电

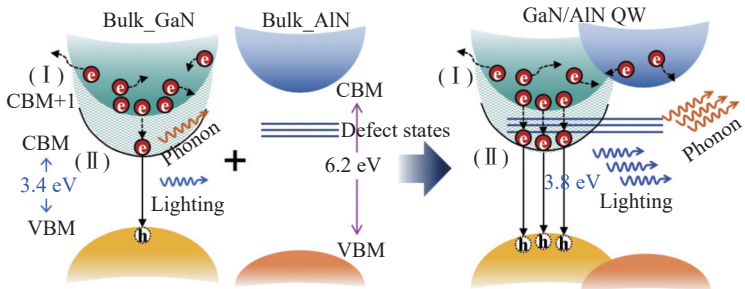

图 1　界面缺陷促进电子冷却的物理机制[1]

Fig. 1　The physical mechanism by which interface defects promote electron cooling[1]

†本文原载于“中国物理学会”微信公众号，刊发前做了少量修改。

收稿日期：2025−12−19

作者简介：黄　森（1980—），男，研究员，研究方向为Ⅲ族氮化物电子器件制备工艺、表征技术及器件物理等（E-mail: huangsen@ime.ac.cn）

子-声子耦合促进热电子冷却。

研究团队通过第一性原理计算与非绝热分子动力学模拟发现，GaN/AlN 量子阱界面处的 VN 缺陷可在 Eg2 区域引入缺陷能级（图 2），从而加速载流子冷却（图 3（a））。分析表明，这是由于 V_N4、V_N6、V_N7 处 $\exp[-(E_i-E_j-\lambda)^2/(4k_BT\lambda)]$ 项的显著增强（图 3（b）），从而提升了跃迁几率。其中，E_i、E_j 和 λ 分别为第 i 和 j 能级的能量和原子弛豫能，k_B 为玻尔兹曼常数。进一步研究发现，V_N1 缺陷能级形成“陷阱”（图 3（c）），而 V_N6 缺陷能级则诱导热电子“逐带冷却”（图 3（d））。计算结果显示，在 GaN/AlN 界面引入 VN 缺陷可使注入电子冷却时间从 8.6 ps 缩短至 0.12 ps，从而显著改善载流子非对称注入问题。

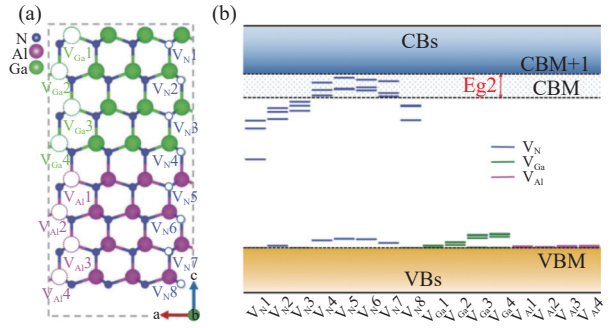

图 2　(a)缺陷位置；(b)缺陷能级[1]

Fig. 2　(a) Defect location; (b) defect energy levels[1]

总体而言，该理论工作通过缺陷工程调控半导体量子阱中的载流子动力学，为解决氮化物光电器件长期存在的注入效率问题提供了一个有吸引力的新方案。与传统电子阻挡层方案相比，该方案无需额外结构设计，有效简化了工艺复杂度，为新一代光电子器件设计提供了新思路。

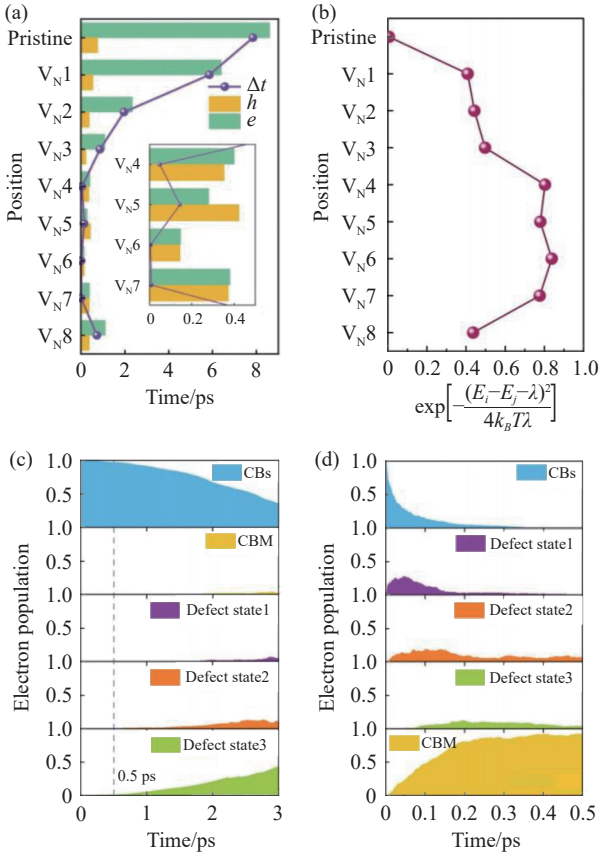

图 3　不同位置 VN 缺陷对体系（a）电子/空穴冷却时间和（b）$\exp[-(E_i-E_j-\lambda)^2/(4k_BT\lambda)]$ 项的影响；(c)V_N1 和 (d)V_N6 热电子占据随时间的演化[1]

Fig. 3　The effect of VN defects at different positions on (a) the electron/hole cooling time and (b) the $\exp[-(E_i-E_j-\lambda)^2/(4k_BT\lambda)]$ term; the time-dependent evolution of hot electron occupation for (c) V_N1 and (d) V_N6[1]

参考文献：

[1] YANG Y X, SHI Z M, LYU S P, et al. Overcoming asymmetric carrier injection in III-nitride light-emitting diodes through defect engineering[J]. Physical Review Letters, 2025, 135: 026402.