

УДК 538.915
EDN: JSKIXR

PACS: 73.40.Kp

Моделирование влияния напряжённого барьерного слоя InAlSb на селективный транспорт носителей в nBn-гетероструктуре InSb/InAlSb/InSbn

© К. А. Савин*, В. С. Кривобок, С. Н. Николаев

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, 119991 Россия

* E-mail: savinkonstantin93@gmail.com

Статья поступила в редакцию 20.05.2026; после доработки 3.06.2026; принята к публикации 06.08.2026

Проведено моделирование nBn-гетероструктуры InSb/InAlSb предназначенной в инфракрасных фотоприемных устройствах среднего спектрального диапазона. Исследовано влияние параметров напряжённого барьерного слоя InAlSb на зонный профиль структуры и транспорт носителей заряда. Основное внимание уделено обеспечению селективного подавления электронного тока при сохранении эффективной дырочной проводимости, что является ключевым условием снижения темнового тока и повышения рабочей температуры фотоприемников. Моделирование выполнено в программной среде COMSOL Multiphysics. Проанализированы различные варианты дизайна барьерного слоя и определены конфигурации, обеспечивающие наиболее благоприятное соотношение барьерных свойств для основных и неосновных носителей заряда. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании InSb-фотоприемников на основе nBn-архитектуры для среднего инфракрасного диапазона.

Ключевые слова: ИК фотодетектор, InSb, моделирование, COMSOL Multiphysics, молекулярно-пучковая эпитаксия, барьерно-диодные гетероструктуры.

DOI: 10.51368/1996-0948-2026-4-19-24

Введение

Инфракрасные (ИК) матричные фотоприемные устройства являются базовым элементом современных систем тепловизионного наблюдения и регистрации теплового излучения [1]. Повышение требований к их чувствительности, быстродействию и энергоэффективности делает актуальной разработку новых материалов и приборных архитектур для среднего инфракрасного диапазона.

Одним из наиболее распространенных материалов для создания фотоприемников среднего ИК-диапазона является антимонид индия – узкозонный полупроводник группы A_3B_5 с шириной запрещенной зоны около 0,23 эВ при 80 К [2]. InSb остается одним из

наиболее востребованных материалов для изготовления высокоскоростных фотодетекторов, работающих в диапазоне 3–5 мкм. На его основе созданы крупноформатные фоточувствительные матрицы, а развитие эпитаксиальных технологий, в частности молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), позволило повысить структурное совершенство слоев, снизить уровень фоновых примесей и улучшить однородность материала [3].

Однако эффективная работа InSb-фотоприемников, как правило, требует охлаждения до криогенных температур, поскольку при повышении рабочей температуры резко возрастает темновой ток и ухудшаются основные характеристики приборов [1, 2]. Это приводит к увеличению массы, стоимости и энергопо-

требления аппаратуры. Поэтому актуальным направлением развития ИК фотоприемников на основе InSb является создание приборов с использованием барьерно-диодных гетероструктур (nBn) [4]. Селективный барьер, блокирующий ток основных носителей заряда (электронов), позволяет понижать темновой ток, не препятствуя свободному перемещению фотогенерированных дырок в валентной зоне. Таким образом, обеспечивается повышение рабочей температуры без существенного ухудшения показателей характеристик.

Наиболее распространённым материалом для барьерного слоя структур на основе InSb является InAlSb [5]. Прежде всего это обусловлено удачным сочетанием хорошего согласования по параметру решетки и широкой запрещенной зоны, позволяющей формировать высокий потенциальный барьер для электронов. Это позволяет эффективно локализовать электроны в InSb, уменьшать их утечку и подавлять паразитные токи, что особенно важно для высокочувствительных и высокоскоростных приборов. Кроме того, InAlSb обеспечивает сравнительно высокое качество гетерограницы и даёт возможность гибко управлять зонной структурой за счёт изменения состава. Исследование его характеристик принципиально важно, поскольку именно свойства барьера – такие, как ширина запрещённой зоны и высота смещения зон, во многом определяют рабочие характеристики устройства. При этом напряжённые барьерные слои InAlSb, несмотря на их практическую значимость для управления зонным профилем и транспортными свойствами гетероструктуры, в настоящее время изучены слабо. В связи с этим представляет интерес анализ именно напряжённых барьеров и оценка их влияния на электронный и дырочный транспорт в структурах типа nBn .

Настоящая работа посвящена моделированию гетероструктуры InSb/InAlSb типа nBn с использованием программного пакета COMSOL Multiphysics. В работе рассмотрены различные варианты дизайна барьерного слоя InAlSb, и проанализировано их влияние на транспорт основных и неосновных носителей заряда. Особое внимание уделено выбору такой конфигурации барьера, которая обеспечивает эффективное подавление электронного

транспорта при сохранении беспрепятственного прохождения дырок. Полученные результаты позволяют определить оптимальный дизайн барьерного слоя для применения в фотоприемных структурах среднего ИК-диапазона.

Зонная структура и деформационные сдвиги энергетических уровней в InSb и InAlSb

Барьерно-диодные структуры, исследуемые в настоящей работе, традиционно получают с помощью МЛЭ. Обусловлено это необходимостью прецизионного контроля параметров гетероэпитаксиального роста, определяющих зонную диаграмму и транспортные свойства структуры. Метод МЛЭ обеспечивает высокую точность задания толщин слоев, состава твердых растворов и профиля легирования, а также формирование резких и морфологически совершенных гетерограниц. Это особенно важно для узкозонных систем InSb/InAlSb, в которых даже незначительные отклонения состава, толщины барьерных слоев или степени межфазного размытия приводят к заметному изменению высоты потенциальных барьеров, положения краев зон и условий переноса носителей. Дополнительным преимуществом МЛЭ является возможность управляемого роста напряженных и псевдоморфных слоев с пониженной плотностью структурных дефектов, что принципиально важно для реализации расчетного энергетического профиля nBn -структур и воспроизводимости их электрофизических и фотоэлектрических характеристик.

При этом достаточно тонкие слои InAlSb, выращенные на InSb, формируются в псевдоморфном состоянии, то есть сохраняют когерентное сопряжение с подложкой без образования релаксационных дефектов. Это обусловлено малым рассогласованием параметров решетки и подтверждается совокупностью структурных данных, полученных как в рамках настоящего направления исследований нашей научной группы в работе [6] для слоя $\text{In}_{0.8}\text{Al}_{0.2}\text{Sb}$ толщиной 70 нм, так и независимыми коллективами в работах [5] для градиентного слоя $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ (x постепенно увеличивался от 0,15 до 0,35) толщиной 50 нм.

Установление псевдоморфного характера роста принципиально важно, поскольку именно в этом случае реализуется упругое напряженное состояние барьерного слоя, определяющее модификацию зонной структуры и энергетического профиля гетеросистемы.

Далее в работе рассматриваются только заведомо псевдоморфные барьерные слои InAlSb, для которых когерентный характер роста обеспечивается либо уменьшением содержания алюминия, а следовательно, снижением рассогласования параметров решётки с InSb, либо уменьшением толщины слоя. Такое ограничение позволяет анализировать гетероструктуры в рамках модели полностью упруго-напряжённого барьера без учёта релаксации и связанных с ней дефектов.

Для псевдоморфного слоя InAlSb на InSb выполняется условие равенства параметров решётки ($a_{\parallel} = a_{sub}$). Здесь $a_{\parallel}$ – параметр решётки в плоскости интерфейса. Тогда продольная деформация слоя определяется выражением

$$\varepsilon_{\parallel} = (a_{\parallel} - a_{layer}) / a_{layer},$$

где a_{layer} – параметр решётки ненапряжённого слоя, а поперечная деформация, в рамках линейной теории упругости для кубических кристаллов [7], имеет вид

$$\varepsilon_{\perp} = -2(C_{12} / C_{11}) \cdot \varepsilon_{\parallel},$$

где C_{11} и C_{12} – упругие постоянные материала слоя. Значения констант, используемые в настоящей работе, здесь и далее приводятся по данным источника [8]. Для описания упругих свойств твёрдого раствора $In_{1-x}Al_xSb$ упругие постоянные C_{11} и C_{12} могут быть оценены по правилу Вегарда:

$$C_{11}(In_{1-x}Al_xSb) = (1-x) \cdot C_{11}(InSb) + x \cdot C_{11}(AlSb),$$

$$C_{12}(In_{1-x}Al_xSb) = (1-x) \cdot C_{12}(InSb) + x \cdot C_{12}(AlSb).$$

Наличие псевдоморфной деформации существенно влияет на электронную структуру $In_{1-x}Al_xSb$. В частности, деформация приводит к изменению ширины запрещённой зо-

ны, расщеплению состояний тяжёлых и лёгких дырок, а также к изменению эффективных масс носителей заряда и, соответственно, их подвижности.

Гидростатическая компонента деформации определяется как след тензора деформации:

$$\varepsilon_h = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = 2\varepsilon_{\parallel} + \varepsilon_{\perp}.$$

В свою очередь биаксиальная сдвиговая компонента деформации, ответственная за снятие вырождения валентной зоны, задаётся выражением:

$$\varepsilon_b = \varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel}.$$

Для расчёта деформационных сдвигов краёв зон используются потенциалы деформации a_c , a_v и b :

$$\Delta E_c = a_c \cdot \varepsilon_h,$$

$$\Delta E_v(hh) = a_v \cdot \varepsilon_h - b \cdot \varepsilon_b,$$

$$\Delta E_v(lh) = a_v \cdot \varepsilon_h + b \cdot \varepsilon_b.$$

Для твёрдого раствора $In_{1-x}Al_xSb$ значения потенциалов деформации определялись в линейном приближении по составу:

$$a_c(In_{1-x}Al_xSb) = (1-x) \cdot a_c(InSb) + x \cdot a_c(AlSb),$$

$$a_v(In_{1-x}Al_xSb) = (1-x) \cdot a_v(InSb) + x \cdot a_v(AlSb),$$

$$b(In_{1-x}Al_xSb) = (1-x) \cdot b(InSb) + x \cdot b(AlSb).$$

Абсолютное положение краев зоны проводимости и валентной зоны материалов относительно вакуума определяется их сродством к электрону χ и величиной запрещённой зоны E_g . При температуре 300 К для бинарного соединения InSb сродство к электрону составляет $\chi(InSb) = 4,59$ эВ при ширине запрещённой зоны $E_g = 0,17$ эВ. Для AlSb электронное сродство равно $\chi(AlSb) = 3,6$ эВ при фундаментальной запрещённой зоне $E_g(X) = 1,62$ эВ. Однако для твёрдого раствора $In_{1-x}Al_xSb$ необходимо учитывать, что при увеличении содержания Al, приблизительно начиная с $x \approx 0,45$, происходит переход от прямозонной структуры к непрямозонной. Поэтому при анализе зонной схемы следует отдельно рассматривать зависимости $E_g(\Gamma)$ и $E_g(X)$: при малых x минимум зоны проводимости расположен в точке Γ , тогда как при

больших x – в точке X . Поскольку ширина запрещённой зоны AlSb в Γ -долине составляет около 2,3 эВ, для оценки положения уровня зоны проводимости в точке Γ можно принять $\chi \approx 2,92$ эВ.

Для твёрдого раствора $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ зависимость χ от состава в первом приближении может быть описана законом Вегарда:

$$\chi(\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}) = (1-x) \cdot \chi(\text{InSb}) + x \cdot \chi(\text{AlSb}).$$

Влияние деформации на сродство к электрону обусловлено деформационным сдвигом зоны проводимости. При растягивающей деформации дно зоны проводимости смещается вниз по энергии, что приводит к увеличению сродства к электрону на величину $\Delta E_c = a_c \cdot \varepsilon_h$.

На основе предложенной модели были построены энергетические диаграммы $n\text{Вп}$ -структур $\text{InSb}/\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$, состоящих из поглощающего слоя InSb толщиной 1 мкм, двух контактных слоев InSb толщиной по 200 нм и барьерного слоя InAlSb (см. рис. 1). Толщину барьерного слоя определяли в зависимости от содержания Al из условия сохранения псев-

доморфного состояния. Концентрация легирующей примеси (n -тип) составляла 10^{16} см^{-3} в чувствительном слое, $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ – в верхнем контактном слое, $4 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ – в нижнем контактном слое и 10^{14} см^{-3} – в барьерном слое. Температура задавалась равной 150 К.

На рисунке 1 можно видеть, что для всех рассмотренных структур барьер проявляется прежде всего как скачок в зоне проводимости. При увеличении содержания Al от $x = 0,1$ до $x = 0,4$ высота электронного барьера последовательно возрастает. В отличие от зоны проводимости разрыв валентной зоны изменяется немонотонно и имеет существенно меньшую величину. Для структур с $x = 0,1$ и $x = 0,2$ наблюдается формирование потенциальной ямы для дырок. При $x = 0,3$ величина ΔE_v близка к нулю, тогда как при $x = 0,4$ возникает небольшой барьер для дырок. Немонотонный характер зависимости ΔE_v (на вставке к рис. 1) обусловлен конкуренцией двух факторов: увеличением разрыва валентной зоны при росте содержания Al в барьерном слое и вкладом биаксиальной сдвиговой компоненты деформации, приводящей к снятию вырождения валентной зоны.

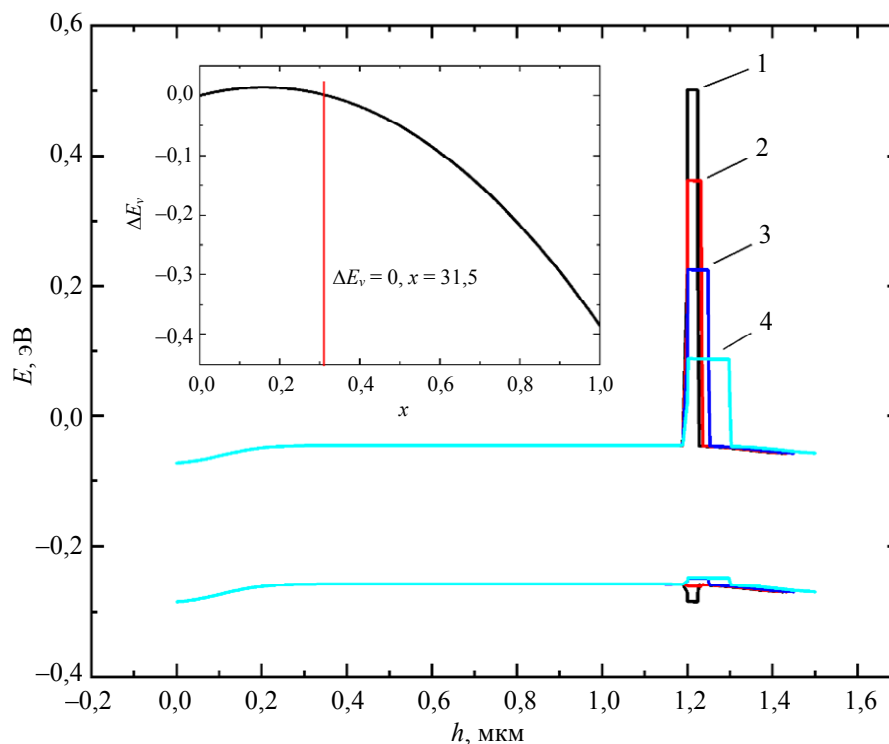


Рис. 1. Энергетические диаграммы $n\text{Вп}$ -структур $\text{InSb}/\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ с различными барьерными слоями: 1 – $x = 0,4$, $h = 25$ нм; 2 – $x = 0,3$, $h = 33$ нм; 3 – $x = 0,2$, $h = 50$ нм; 4 – $x = 0,1$, $h = 100$ нм. На вставке – аналитически рассчитанная зависимость разрыва валентной зоны напряженного $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ от содержания Al

Для всех исследованных *nVn*-гетероструктур $\text{InSb}/\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ были рассчитаны температурные зависимости электронного и дырочного токов в пересчёте на пиксель размером $15 \times 15 \text{ мкм}^2$. Результаты моделирования представлены на рисунке 2 для структур с различным составом и толщиной барьерного слоя. Из рисунка следует, что электронный ток монотонно возрастает с температурой для всех рассмотренных структур, однако его величина существенно зависит от параметров барьерного слоя. С увеличением содержания Al в барьере электронный ток снижается на несколько порядков величины во всём исследованном температурном диапазоне. Это указывает на усиление барьерного подавления транспорта основных носителей при увеличении высоты барьера, связанной с ростом x в слое $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$.

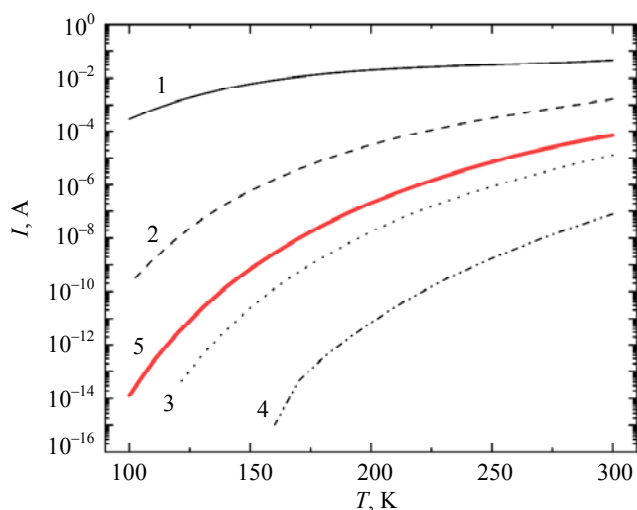


Рис. 2. Температурные зависимости электронного (черным) тока *nVn*-структур $\text{InSb}/\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ с различными барьерными слоями: 1 – $x = 0,1$, $h = 100 \text{ нм}$; 2 – $x = 0,2$, $h = 50 \text{ нм}$; 3 – $x = 0,3$, $h = 33 \text{ нм}$; 4 – $x = 0,4$, $h = 25 \text{ нм}$, а также общая красная кривая 5 для дырочного тока всех структур

В то же время дырочный ток для всех структур практически совпадает, образуя единую температурную зависимость. Такая слабая чувствительность дырочного тока к изменению параметров барьерного слоя свидетельствует о том, что перенос неосновных носителей в исследуемых *nVn*-структурах сохраняется практически неизменным при

варьировании состава и толщины барьера. При этом для структур с $x = 0,3$ и $0,4$ наблюдается переход к режиму $I_e < I_h$, что можно рассматривать как признак достижения эффективной электрон-блокирующей конфигурации, наиболее благоприятной для практической реализации *nVn*-приборов.

Выводы

В работе исследовано влияние упругой деформации на энергетический спектр гетероструктур $\text{InSb}/\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$, и установлена её роль в формировании разрывов зон на гетерогранице. Показано, что изменение состава барьерного слоя приводит к существенной перестройке зонной диаграммы, и определено значение содержания Al, при котором разрыв валентной зоны ΔE_v исчезает. Проведённое моделирование токовых характеристик показало, что использование метастабильного барьерного слоя с $x = 0,3\text{--}0,4$ позволяет эффективно подавить разрыв валентной зоны, ограничить транспорт основных носителей заряда и реализовать режим, в котором темновой ток определяется преимущественно вкладом тяжёлых дырок. Полученные результаты подтверждают перспективность применения метастабильных барьеров $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ повышенного состава Al для оптимизации *nVn*-структур на основе InSb и снижения вклада электронной компоненты в темновой ток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rogalski A. / Prog. Quantum Electron. 2003. Vol. 27. № 2–3. P. 59–210.
2. Rogalski A., Martyniuk P., Kopytko M. / Rep. Prog. Phys. 2016. Vol. 79. P. 046501.
3. Chyi J.-I., Kalem S. / Appl. Phys. Lett. 1988. Vol. 53. № 12. P. 1092–1094.
4. Maimon S., Wicks G. W. / Appl. Phys. Lett. 2006. Vol. 89. № 15. P. 151109.
5. Evirgen A. et al. / Electron. Lett. 2014. Vol. 50. № 20. P. 1472–1473.
6. Савин К. А. и др. / Прикладная физика. 2024. № 4. P. 53–56.
7. Bir G. L., Pikus G. Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors. – New York: Wiley, 1974.
8. Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. G. / J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. № 11. P. 5815–5875.

Influence of a strained InAlSb barrier on electron and hole transport in an InSb-based barrier-diode heterostructure

K. A. Savin*, V. S. Krivobok, and S. N. Nikolaev

P. N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991 Russia

**E-mail: savinkonstantin93@gmail.com*

Received 20.05.2026; revised 3.06.2026; accepted 06.08.2026

This study presents a simulation of an InSb/InAlSb nBn heterostructure intended for use in mid-wave infrared photodetectors. The influence of the parameters of a strained InAlSb barrier layer on the band profile of the structure and on charge carrier transport is investigated. Particular attention is paid to achieving selective suppression of electron current while maintaining efficient hole transport, which is a key requirement for reducing dark current and increasing the operating temperature of photodetectors. The simulations were performed using the COMSOL Multiphysics software environment. Various barrier-layer designs were analyzed, and the configurations providing the most favorable balance of barrier properties for majority and minority charge carriers were identified. The obtained results can be used in the design of InSb photodetectors based on the nBn architecture for the mid-wave infrared range.

Keywords: IR photodetector, InSb, simulation, COMSOL Multiphysics, molecular beam epitaxy, barrier-diode heterostructures.

REFERENCES

1. Rogalski A., Prog. Quantum Electron **27** (2–3), 59–210 (2003).
2. Rogalski A., Martyniuk P., and Kopytko M., Rep. Prog. Phys. **79**, 046501 (2016).
3. Chyi J.-I. and Kalem S., Appl. Phys. Lett. **53** (12), 1092–1094 (1988).
4. Maimon S. and Wicks G. W., Appl. Phys. Lett. **89** (15), 151109 (2006).
5. Evirgen A. et al., Electron. Lett. **50** (20), 1472–1473 (2014).
6. Savin K. A. et al., Applied Physics, № 4, 53–56 (2024) [in Russian].
7. Bir G. L. and Pikus G. Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors. New York: Wiley, 1974.
8. Vurgaftman I., Meyer J. R., and Ram-Mohan L. G., J. Appl. Phys. **89** (11), 5815–5875 (2001).

Об авторах

Савин Константин Антонович, к.ф.-м.н., научный сотрудник, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (Россия, 119991, Москва, Ленинский пр., 53). E-mail: savinkonstantin93@gmail.com SPIN-код: 9596-3586, AuthorID: 820563, ORCID 0000-0002-5674-9577, Scopus Author ID 57209027082

Кривобок Владимир Святославович, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (Россия, 119991, Москва, Ленинский пр., 53). E-mail: kolob7040@gmail.com AuthorID: 135304, ORCID 0000-0001-8846-3891, Scopus Author ID 8604415500

Николаев Сергей Николаевич, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (Россия, 119991, Москва, Ленинский пр., 53). E-mail: nikolaev-s@yandex.ru SPIN-код: 6963-3322, AuthorID: 880828, ORCID 0000-0001-6739-7338, Scopus Author ID 16425853400