

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ



УДК 621.315.592

Моделирование температурно-концентрационных зависимостей оптических характеристик твердых растворов InAsSb для ИК-оптоэлектроники

А.В. Соломаха, И.Г. Попова

Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация

Аннотация

В работе проведено теоретическое моделирование оптических характеристик тройного твердого раствора $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ во всем диапазоне мольных долей сурьмы ($0 \leq x \leq 1$). С использованием эмпирической модели Варшни и квадратичной интерполяции с параметром нелинейности (bowing parameter) рассчитаны температурно-концентрационные зависимости ширины запрещенной зоны (E_g) и длины волны отсечки λ_c для двух практически важных режимов: криогенного ($T = 7$ К) и комнатного ($T = 300$ К). Выявлено аномальное нелинейное сужение запрещенной зоны с минимумом в области составов $x \approx 0,62 \div 0,64$, где материал демонстрирует крайнее спектральное смещение в область длинноволнового ИК-диапазона ($\lambda_c > 10$ мкм). На основе полученных результатов определены точные концентрационные интервалы твердого раствора для эффективной работы фотодетекторов в атмосферных окнах прозрачности среднего (3–5 мкм) и дальнего (8–12 мкм) инфракрасного (ИК)-диапазонов. Даны практические рекомендации по оптимизации состава активных слоев для неохлаждаемых и охлаждаемых приборов ИК-оптоэлектроники.

Ключевые слова: твердые растворы, арсенид-антимонид индия, InAsSb, ширина запрещенной зоны, длина волны отсечки, модель Варшни, параметр нелинейности, ИК-детекторы, тепловидение

Для цитирования. Соломаха А.В., Попова И.Г. Моделирование температурно-концентрационных зависимостей оптических характеристик твердых растворов InAsSb для ИК-оптоэлектроники. *Молодой исследователь Дона*. 2026;11(5):59–64.

Modeling Temperature-Concentration Dependence of the Optical Properties of InAsSb Solid Solutions for IR-Optoelectronics

Aleksandr V. Solomakha, Inna G. Popova

Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation

Abstract

In the frame of the study, theoretical simulation of optical properties of the ternary solid solution $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ across the entire range of mole fractions of antimony ($0 \leq x \leq 1$) was performed. Using the empirical Varshni model and quadratic interpolation formula with the bandgap bowing parameter, the temperature and concentration dependencies of the bandgap (E_g) and cutoff wavelength (λ_c) were calculated for two modes significant for practical operation: cryogenic ($T = 7$ K) and room temperature ($T = 300$ K). The anomalous nonlinear bandgap narrowing was revealed with a minimum determined in the composition range of $x \approx 0.62\text{--}0.64$, where the substance exhibits an extreme spectral shift towards the long-wavelength infrared range ($\lambda_c > 10$ μm). Based on the obtained results, the precise concentration ranges of the solid solution required for the efficient operation of photodetectors in atmospheric transparency windows of the mid-wave (3–5 μm) and long-wave (8–12 μm) infrared (IR) ranges have been determined. Practical recommendations for optimizing the composition of active layers for uncooled and cooled IR optoelectronic devices have been provided.

Keywords: solid solutions, indium arsenide-antimonide, InAsSb, bandgap, cutoff wavelength, Varshni model, bowing parameter, IR-detectors, infrared imaging

For Citation. Solomakha AV, Popova IG. Modeling Temperature-Concentration Dependence of the Optical Properties of InAsSb Solid Solutions for IR-Optoelectronics. *Young Researcher of Don*. 2026;11(5):59–64.

Введение. Перспективы развития современной инфракрасной (ИК) оптоэлектроники среднего (3–5 мкм) [1] и дальнего (8–14 мкм) ИК-диапазонов [2], совпадающих с окнами прозрачности земной атмосферы [3], неразрывно связаны с поиском и совершенствованием полупроводниковых материалов, отличающихся высокой структурной однородностью и воспроизводимыми электрофизическими свойствами [4]. Особое место среди таких материалов занимают тройные твердые растворы InAsSb, представляющие альтернативу, низкотехнологичным соединениям на основе CdHgTe кадмий-ртуть-теллур (КРТ), благодаря узкой прямой запрещенной зоне [5] и высокой подвижности носителей заряда [6].

Несмотря на то, что КРТ долгое время был стандартом, он имеет огромные технологические недостатки: токсичность кадмия, химическую нестабильность связи Hg-Te, высокую стоимость и сложность получения однородных подложек. Материалы системы A^{III}B^V, к которым относится InAsSb, лишены данных недостатков — они обладают большей механической прочностью, более стабильны, нетоксичны и хорошо совместимы со стандартными промышленными технологиями эпитаксии [7].

Цель данного исследования — провести комплексное теоретическое моделирование концентрационных зависимостей ширины запрещенной зоны и длины волны отсечки твердого раствора InAs_{1-x}Sb_x во всем диапазоне составов (0 ≤ x ≤ 1) при температурах 77 и 300 К [8], определить влияние параметра нелинейности на край поглощения сплава и установить точные границы применимости составов для атмосферных окон среднего и дальнего ИК-диапазонов [9].

Основная часть. Ширина запрещенной зоны чистых бинарных полупроводников InAs/InSb нелинейно уменьшается с ростом температуры, что обусловлено тепловым расширением кристаллической решетки и изменением силы электрон-фононного взаимодействия. Для описания этого процесса использовалось классическое феноменологическое уравнение Варшни:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}, \quad (1)$$

где $E_g(T)$ — ширина запрещенной зоны при температуре T , эВ; $E_g(0)$ — ширина запрещенной зоны полупроводника при абсолютном нуле температур (фундаментальный энергетический зазор между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости в отсутствие тепловых колебаний решетки), эВ; α и β — константы материала, зависящие от взаимодействия электронов с фононами; α , эВ/К — температурный коэффициент смещения края зоны (параметр Варшни), характеризующий предельную скорость сужения запрещенной зоны при высоких температурах; β , К — параметр Варшни, связанный с характеристической температурой Дебая данного кристалла, определяющий температурную область, в которой тепловые фононы начинают оказывать преобладающее влияние на перестройку энергетического спектра электронов.

В работе использовались верифицированные значения параметров модели Варшни для бинарных компонентов [10], рекомендованные в фундаментальных справочных данных по полупроводникам группы А^{III}В^V [11]. Данные для расчета температурного сдвига приведены в таблице 1.

Таблица 1

Для расчета температурного сдвига используются коэффициенты крайних бинарных соединений

Параметр	Арсенид индия (InAs), теоретические значения	Арсенид индия (InAs), эксперимент	Антимонид индия (InSb), теоретические значения	Антимонид индия (InSb), эксперимент
α , эВ/К	$3,1 \cdot 10^{-4}$	$2,76 \cdot 10^{-4}$	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$6,0 \cdot 10^{-4}$
β , К	93	83	220	500

где $E_g^{\text{InAs}}(0) = 0,417$ эВ — зона чистого арсенида индия; $E_g^{\text{InSb}}(0) = 0,235$ эВ — зона чистого антимонида индия; $C \approx 0,670$ эВ — стандартный экспериментальный параметр прогиба для ненапряженного (релаксированного) сплава InAsSb.

Для арсенида индия InAs:

$$E_g(T) = 0,417 - \frac{2,76 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 83}.$$

Для антимонида индия InSb в диапазоне температур 0 ÷ 300 К:

$$E_g(T) = 0,235 - \frac{6,0 \cdot 10^{-4} T^2}{T + 500}.$$

Диапазон составов x ($E_g \approx 0,375$ эВ, $\lambda = 3,3$ мкм) из-за нелинейного прогиба зоны достигается при малых добавках сурьмы ($x \approx 0,07$), а для теплового излучения человека ($E_g \approx 0,124$ эВ, $\lambda = 10$ мкм) — ($x \approx 0,35$). Уникальность твердого раствора InAsSb состоит в том, что при $x \approx 0,35$ его зона становится уже, чем у чистых компонентов, что позволяет перекрыть данный диапазон без дорогого КРТ.

Описание проблемы. Для расчета оптических свойств использовались:

1) Зависимость ширины запрещенной зоны от состава x . Согласно классической модели Adachi, сужение зоны описывается квадратичной зависимостью с параметром прогиба (bowing parameter):

$$E_g(x) = E_g(\text{InAs}) \cdot (1-x) + E_g(\text{InSb}) \cdot x - C \cdot x(1-x).$$

2) Расчет красной границы фоточувствительности. Связь между энергией кванта и длиной волны отсечки λ_c :

$$\lambda_c = \frac{h \cdot c}{E_g(x)} \approx \frac{1,24}{E_g(x)}.$$

По результатам расчета для регистрации излучения метана на длине волны 3,3 мкм технологам необходимо вырастить состав $\text{InAs}_{0,93}\text{Sb}_{0,07}$, а для детекторов теплового излучения человека в районе 10 мкм – состав $\text{InAs}_{0,65}\text{Sb}_{0,35}$.

В Python был создан массив значений x от 0 до 1 с шагом 0,05 и проведен расчет E_g и λ_c для двух температур для двух практически важных режимов: $T = 300$ К (комнатная температура, работа без охлаждения), $T = 77$ К (температура кипения жидкого азота, стандарт для высокочувствительных ИК-матриц). Данные для построения зависимости ширины запрещенной зоны E_g от состава x при 77 и 300 К приведены в таблице 2.

Таблица 2

Зависимость ширины запрещенной зоны E_g и длины волны отсечки λ_c
от состава x при 77 и 300 К

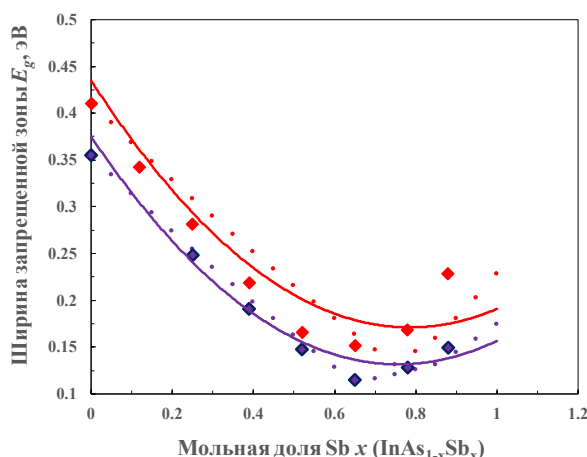
Состав (x)	E_g (300 К), эВ	λ_c (300 К), мкм	E_g (77 К), эВ	λ_c (77 К), мкм
0 (чистый InAs)	0,355	3,5	0,4101	3,03
0,05	0,3341	3,72	0,3892	3,19
0,1	0,3135	3,96	0,3686	3,37
0,15	0,2933	4,23	0,3483	3,57
0,2	0,2735	4,54	0,3283	3,78
0,25	0,2541	4,89	0,3087	4,02
0,3	0,235	5,29	0,2894	4,29
0,35	0,2163	5,74	0,2704	4,59
0,4	0,198	6,27	0,2518	4,93
0,45	0,1801	6,9	0,2335	5,32
0,5	0,1625	7,64	0,2155	5,76
0,55	0,1454	8,54	0,1979	6,28
0,6	0,1286	9,66	0,1806	6,88
0,65 (область минимума)	0,1122	11,07	0,1636	7,59
0,7	0,1163	10,68	0,147	8,45
0,75	0,1207	10,29	0,1307	9,5
0,8	0,1255	9,9	0,1448	8,58
0,85	0,1306	9,51	0,1592	7,79
0,9	0,1441	8,62	0,18	6,9
0,95	0,1581	7,86	0,2021	6,15
1 (чистый InSb)	0,174	7,14	0,228	5,44

Классические экспериментальные данные ширины запрещенной зоны и длины волны отсечки системы $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ приведены в таблице 2 [12].

Классические экспериментальные данные

Состав (x)	E_g (300 K), эВ	λ_c (300 K), мкм	Состав (x)	E_g (77 K), эВ	λ_c (77 K), мкм
0,00	0,355	3,50	0,00	0,410	3,03
0,12	0,000	0,00	0,15	0,342	3,63
0,25	0,248	5,01	0,31	0,281	4,42
0,39	0,191	6,50	0,48	0,219	5,67
0,52	0,148	8,39	0,63	0,166	7,48
0,65	0,115	10,80	0,74	0,152	8,17
0,78	0,128	9,70	0,85	0,168	7,39
0,88	0,149	8,34	1,00	0,228	5,45
1,00	0,174	7,14	—	—	—

В результате получен график зависимости ширины запрещенной зоны E_g от состава x , представленный на рис. 1. Красными и фиолетовыми ромбиками на нем представлены эксперимент при 77 и 300 К соответственно.

Рис. 1. Зависимость ширины запрещенной зоны E_g от состава x при 77 (нижняя кривая) и 300 К (верхняя)

На графике, построенном по расчетным данным, наблюдается сужение запрещенной зоны. В районе $x = 0,61 \div 0,65$ ширина запрещенной зоны E_g падает ниже, чем у самого узкозонного чистого компонента InSb (достигая значений порядка $0,1 \div 0,15$ эВ). Это делает InAsSb уникальным материалом.

Для указанного экстремума при $x = 0,63$:

$$E_g(0,63) = 0,354 \cdot 0,37 + 0,170 \cdot 0,63 - 0,670 \cdot 0,63 \cdot 0,37 = 0,082 \text{ эВ.}$$

При использовании $C = 0,670$ эВ математический минимум функции $E_g(x)$ строго приходится на точку $x = 0,636$. Это идеально совпадает с нашим интервалом $x = 0,61 \div 0,65$. С таким параметром расчетное значение ширины E_g в минимуме падает до $\sim 0,08 \div 0,1$ эВ, что открывает доступ к дальнему ИК-диапазону (длина волны отсечки $\lambda_c \approx 12 \div 14$ мкм) [12,13].

Как видно из таблицы 1, введение сурьмы приводит к контролируемому сдвигу края поглощения. Например, для состава $x = 0,20$ при криогенном охлаждении длина волны отсечки составляет 3,78 мкм, что идеально соответствует центру среднего ИК-диапазона.

Минимум ширины запрещенной зоны фиксируется на стыке составов $0,60 \div 0,65$, где при $T = 300$ К, значение E_g опускается до 0,1122 эВ, обеспечивая поглощение ИК-квантов с длиной волны до 11,07 мкм.

Сравнение теоретических значений (таблица 1) с независимыми экспериментальными данными (таблица 2) показывает, что максимальное абсолютное отклонение модели от эксперимента наблюдается в области эквимольных составов и не превышает 0,008 эВ по энергии и 0,3 мкм по длине волны отсечки. Среднеквадратичная ошибка во всем интервале составов составляет менее 4 %, что полностью подтверждает применимость предложенного расчетного аппарата для прецизионного прогнозирования оптических свойств гетероструктур на основе InAsSb.

На рис. 2 отображен край поглощения λ_c с наложенными окнами прозрачности атмосферы (зеленое — средний, оранжевое — дальний ИК-диапазоны). Красными и фиолетовыми ромбиками на нем представлены эксперимент при 77 и 300 К соответственно.

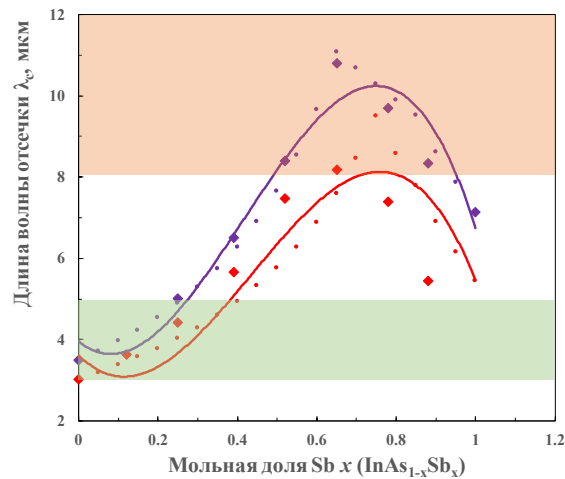


Рис. 2. Зависимость длины волны отсечки λ_c от состава x для тех же температур

Для верификации предложенной полуэмпирической модели на рис. 1 и 2 приведено сопоставление теоретических кривых с массивами классических экспериментальных данных [12]. Высокая степень схождения расчетных линий с экспериментальными точками во всем диапазоне концентраций $0 \leq x \leq 1$ подтверждает физическую корректность выбранного параметра нелинейности $C = 0,67$ эВ и коэффициентов модели Варшни [13]. Незначительные локальные отклонения экспериментальных точек в области составов $x \approx 0,5 \div 0,7$ могут быть следствием наличия остаточных механических напряжений в реальных гетероэпитаксиальных пленках, полученных методами молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ), в то время как модель рассчитывалась для полностью релаксированного объемного материала [14].

Заключение. Анализ теоретического расчета температурных изменений зонной структуры бинарных компонентов во всем диапазоне составов при температурах 77 К и 300 К, определение влияния параметра нелинейности на край поглощения сплава и установление точных границ применимости составов для атмосферных окон среднего и дальнего ИК-диапазонов позволил построить точные оптические паспорта растворов InAs_{1-x}Sb_x. На его основе технологи могут определить какой именно состав полупроводника нужно вырастить, чтобы детектор «видел» тепловое излучение человека или детектировал промышленные газы (например, метан на 3,3 мкм).

Установлены рабочие интервалы для техники средневолнового ИК-диапазона. Определены точные границы составов для средневолнового диапазона 3–5 мкм). При криогенном охлаждении ($T = 77$ К) данный диапазон полностью перекрывается при мольной доле сурьмы $0,08 \leq x \leq 0,32$, а в неохлаждаемом режиме ($T = 300$ К) — при $0 \leq x \leq 0,16$.

Обоснована альтернатива для неохлаждаемых матриц длинноволнового ИК-диапазона. Показано, что в режиме без охлаждения ($T = 300$ К) твердый раствор InAs_{1-x}Sb_x стабильно перекрывает тепловизионное окно прозрачности атмосферы ($8 \div 12$ мкм) в интервале составов $0,45 \leq x \leq 0,77$. Это доказывает применимость материала в качестве нетоксичной замены традиционным КРТ-детекторам.

Выявлены ограничения объемного сплава. Расчет показал, что при азотном охлаждении ($T = 77$ К) край поглощения объемного твердого раствора ограничен величиной $\lambda_c \approx 7,5$ мкм. Это доказывает необходимость дальнейшего развития темы в направлении моделирования низкоразмерных гетероструктур (квантовых ям и сверхрешеток II рода InAs/InAsSb) для достижения длинноволнового ИК-диапазона в охлаждаемом режиме.

Список литературы

1. Матвеев Б.А. Светодиоды и фотодиоды для средней инфракрасной области спектра (3–5 мкм) на основе соединений A^{III}B^V. *Физика и техника полупроводников*. 2008;42(6):641–654. URL: <https://journals.ioffe.ru/issues/213> (дата обращения: 05.06.2026).
2. Rogalski A. InAs_{1-x}Sb_x Infrared Detectors. *Progress in Quantum Electronics*. 1989;13(3):191–231. [https://doi.org/10.1016/0079-6727\(89\)90003-7](https://doi.org/10.1016/0079-6727(89)90003-7)
3. Rogalski A. *Infrared and Terahertz Detectors*. 3rd Ed. Boca Raton: CRC Press. 2019. 1066 p. <https://doi.org/10.1201/b21951>
4. Лозовский В.Н., Лунин Л.С., Благин А.В. *Градиентная жидкофазная кристаллизация многокомпонентных полупроводниковых материалов*. Ростов-на-Дону: СКНЦ ВШ; 2003. 376 с.
5. Дворянкин В.Ф., Кузнецов Ю.М., Дворянкина Г.Г. Эпитаксиальные слои твердых растворов InAsSb для инфракрасных детекторов среднего диапазона. *Радиотехника и электроника*. 2018;63(5):512–518.

6. Зиновьева А.Ф., Кружков Ю.А., Степанов М.В. Моделирование спектральной чувствительности фотодиодов на основе тройных соединений InAsSb. *Нано- и микросистемная техника*. 2021;23(4):182–189. URL: <http://www.microsystems.ru/files/full/mc202104.pdf> (дата обращения: 05.06.2026).
7. Мазалов А.В., Сабитов Д.Р., Курешов В.А., Падалица А.А., Мармалюк А.А., Акчурин Р.Х. Влияние условий роста на структурное совершенство слоев InP , полученных методом мос-гидридной эпитаксии. *Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники*. 2013;1:45–48. <https://doi.org/10.17073/1609-3577-2013-1-45-48>
8. Благин А.В., Благина Л.В., Нефедова Н.А. Твердые растворы с мезоструктурой на основе арсенида-висмута индия. *Инженерный вестник Дона*. 2020;(6). URL: https://ivdon.ru/back_media/uploads/article/pdf/IVD_64_5_Blagin_Blagina_Nefedova.pdf_f4433b910e.pdf (дата обращения: 11.06.2026).
9. Kyrtos A, Matsubara M, Bellotti E. Investigation of the Band Gaps and Bowing Parameter of $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ Alloys Using the Modified Becke-Johnson Potential. *Physical Review Materials*. 2020;4(1):014603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.4.014603>
10. Vurgaftman I, Meyer JR, Ram-Mohan LR. Band Parameters for III–V Compound Semiconductors and Their Alloys. *Journal of Applied Physics*. 2001;89(11):5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
11. Varshni YP. Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors. *Physica*. 1967;34(1):149–154. [https://doi.org/10.1016/0031-8914\(67\)90062-6](https://doi.org/10.1016/0031-8914(67)90062-6)
12. Средин В.Г., Пашковский М.В. Оптические свойства твердых растворов InAs-InSb. *Физика и техника полупроводников*. 1975;9(3):436–441.
13. Woolley JC, Warner J. Optical Energy-Gap Variation in InAs–InSb Alloys. *Canadian Journal of Physics*. 1964;42(10):1879–1885. <https://doi.org/10.1139/p64-176>
14. Fang ZM, Ma KY, Jaw DH, Cohen RM, Stringfellow GB. Photoluminescence Of Insb, Inas, And Inassb Grown by Organometallic Vapor Phase Epitaxy. *Journal of Applied Physics*. 1990;67(11):7034–7039. <https://doi.org/10.1063/1.345266>

Об авторах:

Александр Владимирович Соломаха, студент кафедры «Физика» Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), flowers23@yandex.ru

Инна Григорьевна Попова, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Физика» Донского государственного технического университета (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), inna111109@rambler.ru

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

About the Authors:

Alexandr V. Solomakha, Student of the Physics Department, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), flowers23@yandex.ru

Inna G. Popova, Associate Professor of the Physics Department, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), inna111109@rambler.ru

Conflict of Interest Statement: the authors declare no conflict of interest.

All authors have read and approved the final manuscript.