

НАУЧНЫЙ ОТДЕЛ

НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОМАТЕРИАЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 3. С. 346–356
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 3, pp. 346–356
https://fizika.sgu.ru https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-3-346-356, EDN: OGPIIC

Научная статья
УДК 621.315.592

Численное моделирование газочувствительности нитевидных нанокристаллов GaAs, InAs и GaP с учётом поверхностных состояний

Я. М. Можаров[1], Д. М. Митин[2], А. В. Павлов[2,3], А. А. Воробьёв[2,3,4], А. М. Можаров[2,3], В. В. Федоров[2,3], В. В. Харитонова[2], И. С. Мухин[2,3]✉

[1]Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Россия, 119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1
[2]Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж. И. Алферова Российской академии наук, Россия, 194021, г. Санкт-Петербург, ул. Хлопина, д. 8, корп. 3
[3]Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29
[4]ООО «Ренесенс», Россия, 194021, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 6, стр. 1

Можаров Ярослав Михайлович, магистрант факультета наук о материалах, yarik.mozh@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-6393-6215, AuthorID: 1324450
Митин Дмитрий Михайлович, кандидат технических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии, mitin@spbau.ru, https://orcid.org/0000-0003-4517-0807, AuthorID: 878401
Павлов Александр Валерьевич, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии, pavlov_aleks@spbau.ru, https://orcid.org/0000-0003-1125-6653
Воробьёв Александр Андреевич, кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии, alex.spbau@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-2077-1243, AuthorID: 1315060
Можаров Алексей Михайлович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории возобновляемых источников энергии, mozharov@spbau.ru, https://orcid.org/0000-0002-8661-4083, AuthorID: 812200
Федоров Владимир Викторович, кандидат физико-математических наук, заведующий научно-исследовательской лабораторией «Научно-исследовательская лаборатория эпитаксиальных наноструктур соединений A3B5 на кремнии», burunduk.uk@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-5547-9387, AuthorID: 460061
Харитонова Варвара Васильевна, лаборант лаборатории возобновляемых источников энергии, wox727303@gmail.ru, https://orcid.org/0009-0001-6595-6914, AuthorID: 1343083
Мухин Иван Сергеевич, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией возобновляемых источников энергии, imukhin@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-9792-045X, AuthorID: 546023

Аннотация. Проведено численное моделирование газочувствительности одиночных нитевидных нанокристаллов на основе соединений полупроводниковых материалов GaAs, InAs и GaP с различными типами проводимости, диаметрами от 50 до 200 нм и широким диапазоном степеней легирования при комнатной температуре. Разработана двумерная аксимметричная модель, реализованная в пакете COMSOL Multiphysics с явным учетом поверхностных состояний на боковой поверхности нанокристалла. Влияние газовой среды

© *Можаров Я. М., Митин Д. М., Павлов А. В., Воробьёв А. А., Можаров А. М., Федоров В. В., Харитонова В. В., Мухин И. С., 2026*

описано безразмерным параметром, характеризующим относительное изменение концентрации поверхностных состояний и соответствующего поверхностного заряда. На основе расчетов построены карты зависимости газовой чувствительности и сопротивления нанокристалла от степени легирования, диаметра и параметра воздействия газа. Показано, что максимальная газовая чувствительность достигается в диапазонах легирования, где проводимость нанокристалла существенно определяется поверхностным зарядом, а сопротивление остается в пределах, удобных для электрических измерений. Выделены оптимальные режимы работы сенсоров на основе нитевидных нанокристаллов GaAs, InAs и GaP для одиночных измерительных структур. Обсуждаются возможности использования полученных результатов при проектировании гибридных газочувствительных устройств.

Ключевые слова: численное моделирование, нитевидные нанокристаллы, газовая чувствительность, газовые сенсоры, поверхностные состояния, арсенид галлия, арсенид индия, фосфид галлия, легирование полупроводников, проводимость

Благодарности: Работы по численному моделированию газовой чувствительности выполнены при поддержке Российского научного фонда (проект № 25-79-10245). Подготовка теоретической модели заселенности поверхностных состояний проведена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание FSEG-2024-0017, FSRM-2026-0035).

Для цитирования: *Можаров Я. М., Митин Д. М., Павлов А. В., Воробьёв А. А., Можаров А. М., Федоров В. В., Харитонова В. В., Мухин И. С.* Численное моделирование газочувствительности нитевидных нанокристаллов GaAs, InAs и GaP с учётом поверхностных состояний // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 3. С. 346–356. https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-3-346-356, EDN: OGPIIC

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Numerical modeling of gas sensitivity of GaAs, InAs and GaP nanowires with account of surface states

Ya. M. Mozharov[1], D. M. Mitin[2], A. V. Pavlov[2,3], A. A. Vorobyev[2,3,4], A. M. Mozharov[2,3], V. V. Fedorov[2,3], V. V. Kharitonova[2], I. S. Mukhin[2,3]✉

[1]Lomonosov Moscow State University, 1 Leninskie Gory, Moscow 119991, Russia
[2]Alferov Saint Petersburg National Research Academic University of the Russian Academy of Sciences, 8/3 Khlopina St., St. Petersburg 194021, Russia
[3]Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg 195251, Russia
[4]LLC "Renesens", 6/1 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg 194021, Russia

Yaroslav M. Mozharov, yarik.mozh@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-6393-6215, AuthorID: 1324450
Dmitry M. Mitin, mitin@spbau.ru, https://orcid.org/0000-0003-4517-0807, AuthorID: 878401
Alexandr V. Pavlov, pavlov_aleks@spbau.ru, https://orcid.org/0000-0003-1125-6653
Alexandr A. Vorobyev, alex.spbau@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-2077-1243, AuthorID: 1315060
Alexey M. Mozharov, mozharov@spbau.ru, https://orcid.org/0000-0002-8661-4083, AuthorID: 812200
Vladimir V. Fedorov, burunduk.uk@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-5547-9387, AuthorID: 460061
Varvara. V. Kharitonova, wox727303@gmail.ru, https://orcid.org/0009-0001-6595-6914, AuthorID: 1343083
Ivan S. Mukhin, imukhin@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-9792-045X, AuthorID: 546023

Abstract. ***Background and Objectives*:** Gas sensitivity of single semiconductor nanowires is strongly controlled by surface states and by the interplay between surface charge and bulk doping level. Nanowires based on III–V compounds such as GaAs, InAs and GaP combine high carrier mobility, controllable doping and large surface-to-volume ratio, which makes them promising building blocks for compact gas sensors. However, for these materials there is still no systematic quantitative description that would link nanowire diameter, doping type and level, and surface state modification by gas to the overall sensor response and resistance. The objective of this work is to develop a unified numerical model and to identify optimal operation regimes for gas sensors based on single GaAs, InAs and GaP nanowires at room temperature. ***Materials and Methods*:** We use a two-dimensional axisymmetric drift-diffusion-Poisson model implemented in COMSOL Multiphysics (Semiconductor module) to describe a single nanowire with diameter from 50 to 200 nm and length of 1 μm. The model explicitly accounts for surface states on the lateral nanowire surface and includes *n*- and *p*-type bulk doping over a wide range of concentrations. The action of the gas environment is introduced via a dimensionless parameter that describes the relative change in the surface state concentration and, consequently, in the surface charge density. For each combination of material, conductivity type, diameter and gas parameter we calculate the spatial distributions of potential and carrier concentrations and evaluate the nanowire conductance and resistance. The relative gas sensitivity is defined as the normalized change of conductance between the initial and gas–exposed states. ***Results*:** The calculated maps of gas sensitivity and resistance as functions of doping level, diameter and gas parameter reveal parameter regions where the nanowire conductance is strongly controlled by surface charge, while the resistance remains within a convenient range for electrical measurements. For GaAs nanowires with both *n*- and *p*-type conductivity, the model predicts a pronounced relative gas response in doping ranges where the resistance remains close to the upper boundary acceptable for single-nanowire readout. InAs nanowires provide somewhat lower maximal sensitivity but significantly lower resistance and wider sets of workable regimes due to the presence of an inversion surface accumulation layer. GaP nanowires show a narrower window of parameters where gas sensitivity and resistance are simultaneously suitable for practical applications. ***Conclusion*:** The developed model provides a unified framework for analyzing and comparing gas sensitivity of GaAs, InAs and GaP nanowires with different diameters and doping levels. The obtained maps of gas sensitivity and resistance can be used to select optimal combinations of material, diameter and doping for single-nanowire gas sensors and for hybrid sensing architectures where III–V nanowires are combined with other conducting nanomaterials.

Keywords: numerical modeling, nanowires, gas sensitivity, gas sensors, surface states, gallium arsenide, indium arsenide, gallium phosphide, semiconductor doping, conductance

Acknowledgments: The numerical modeling of gas sensitivity was supported by the Russian Science Foundation (project No. 25-79-10245). The development of the theoretical model of surface-state occupancy was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation under the state assignment FSEG-2024-0017, FSRM-2026-0035.

For citation: Mozharov Ya. M., Mitin D. M., Pavlov A. V., Vorobyev A. A., Mozharov A. M., Fedorov V. V., Kharitonova V. V., Mukhin I. S. Numerical modeling of gas sensitivity of GaAs, InAs and GaP nanowires with account of surface states . *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 3, pp. 346–356 (in Russian). https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-3-346-356, EDN: OGPIIC

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Разработка компактных высокочувствительных газовых сенсоров является одной из приоритетных задач современной сенсорики для экологического мониторинга, промышленной безопасности и биомедицинских приложений. Одним из наиболее популярных подходов является использование полупроводниковых наноструктурированных материалов, в том числе нанопроволок и нитевидных нанокристаллов (ННК), обладающих развитой поверхностью и высокой чувствительностью проводимости к адсорбции молекул газа [1–4]. Вместе с тем для сенсорных структур на основе нанодисперсных и печатных полупроводниковых материалов (преимущественно на основе соединений элементов II и VI групп Периодической таблицы Д. И. Менделеева A^2B^6) высокая чувствительность нередко сочетается с повышенным сопротивлением и сравнительно медленной электрической реакцией, поскольку перенос заряда в таких системах определяется не только свойствами отдельного кристаллита, но и межзеренными барьерами, контактами между частицами и структурной неоднородностью слоя [5]. С этой точки зрения ННК представляют собой более кристаллически совершенную систему, в которой большая удельная поверхность сочетается с непрерывным проводящим каналом. Это делает ННК перспективной платформой для создания быстродействующих газовых сенсоров, в которых высокая чувствительность может быть достигнута без характерного для дисперсных пленок сильного ухудшения транспортных свойств. Среди таких материалов особый интерес представляют нитевидные наноструктуры соединений элементов III и V групп Периодической таблицы Д. И. Менделеева A^3B^5, таких как GaAs, InAs и GaP. Эти материалы сочетают развитую поверхность, высокую подвижность носителей заряда и возможность контролируемого легирования в широком диапазоне концентраций, что делает их перспективной платформой для создания газочувствительных структур. Для ННК InAs продемонстрирована высокая чувствительность к ряду газообразных и летучих органических соединений, включая спирты и диоксид азота – как в одиночных нанопроводниковых транзисторах, так и в массивах вертикально ориентированных ННК с газопроницаемыми электродами [6–10].

За последние годы предложено множество теоретических и численных подходов к описанию работы газовых сенсоров на основе одномерных наноструктур, прежде всего, на оксидных материалах. Во многих работах моделируется распределение потенциала и заряда в цилиндрических или проволочных структурах путем решения уравнения Пуассона, что позволяет связать толщину обедненного слоя, диаметр наноструктуры и проводимость сенсора при заданной плотности поверхностного заряда. Продемонстрировано, что отклик сенсора может насыщаться при увеличении поверхностного заряда, а чувствительность возрастает при уменьшении диаметра нанопроволок [2–4, 11–12]. Аналогичные подходы применялись и к кремниевым нанопроволокам, где эволюция поверхностных состояний при воздействии различных газов описывалась на основе трехмерного численного моделирования.

Для ННК на основе соединений A^3B^5 и, особенно, для InAs с выраженным приповерхностным слоем накопления заряда) большинство работ сосредоточено на экспериментальном изучении газочувствительности и качественном анализе роли поверхностных состояний [6]. Численные модели, как правило, либо ориентированы на конкретные архитектуры (например, полевые транзисторы на основе нанопроволок или гибридные структуры на основе ННК InAs и проводящих наноматериалов), либо охватывают узкий диапазон параметров и не предоставляют систематических карт зависимости чувствительности от диаметра, легирования и характеристик поверхности [6–8].

Газовая чувствительность полупроводниковых ННК в существенной степени определяется

состоянием их поверхности, включая плотность и энергетическое положение поверхностных состояний, а также распределением объемного и приповерхностного заряда. Адсорбция газовых молекул может приводить к изменению заполнения поверхностных ловушек и перераспределению носителей заряда в объеме ННК, что вызывает заметное изменение проводимости даже при малой концентрации молекул аналита в окружающей среде. При этом на чувствительность и рабочее сопротивление сенсора существенно влияют геометрические параметры (радиус ННК), тип и степень легирования, а также свойства поверхностных состояний.

Несмотря на значительное количество экспериментальных и численных работ по газочувствительности одномерных наноструктур, до сих пор отсутствует систематическое теоретико-численное описание, позволяющее в рамках единой модели сопоставить влияние диаметра ННК, уровня и типа легирования, а также изменения плотности поверхностных состояний на газовую чувствительность и сопротивление ННК полупроводниковых соединений A^3B^5 в широком диапазоне параметров [2–4, 8, 10–12]. Это затрудняет целенаправленный выбор оптимальных режимов легирования и геометрии при проектировании сенсоров на основе одиночных ННК, где рабочее сопротивление ограничено сверху возможностями измерительной электроники, а чувствительность – требованиями к минимально различимому сигналу.

Цель настоящей работы – провести численное моделирование газочувствительности одиночных нитевидных нанокристаллов GaAs, InAs и GaP с *n*- и *p*-типами проводимости, диаметрами от десятков до сотен нанометров и широким диапазоном степеней легирования при комнатной температуре при явном учете поверхностных состояний. Для достижения поставленной цели в работе применяется численное решение самосогласованной системы уравнений Пуассона и непрерывности (дрейфово-диффузионная модель) методом конечных элементов с учетом статистики Ферми – Дирака для электронов и дырок. Влияние газа моделируется через безразмерный параметр, описывающий относительное изменение концентрации поверхностных состояний и, тем самым, поверхностного заряда, что позволяет рассматривать полученные результаты как параметрические карты газовой чувствительности для широкого класса адсорбционно-активных молекул. На основе полученных карт зависимости газовой чувствительности и сопротивления от легирования, диаметра и параметра поверхностного воздействия сопоставляются оптимальные режимы работы сенсоров на основе ННК GaAs, InAs и GaP и формулируются рекомендации по выбору материалов и областей параметров для последующих экспериментальных исследований.

1. Модель и методика расчета

1.1. Геометрия и постановка задачи

Расчеты проводились в программном пакете COMSOL Multiphysics с использованием модуля Semiconductor в двумерной аксимметричной постановке. Использовались типичные материальные параметры соответствующих полупроводников (табл. 1), взятые из [13, 14]. Расчет зонной структуры проводился с учетом статистики Ферми–Дирака для обоих типов носителей заряда. Нитевидный нанокристалл был представлен в виде цилиндра длиной 1 мкм, а диаметр варьировался в процессе расчета. Рассматривались диаметры 50, 100, 150 и 200 нм при температуре 300 K.

Для каждого материала (GaAs, InAs, GaP) учитывались два типа проводимости (*n*- и *p*-), задаваемые однородным объемным легированием акцепторами или донорами с концентрацией в диапазонах 10^{14}–10^{20} см$^{-3}$ для *p*-типа и 10^{14}–10^{19} см$^{-3}$ для *n*-типа. В ходе расчетов варьировались степень легирования и параметр, описывающий воздействие газа на поверхностные состояния; по рассчитанным распределениям носителей определялась проводимость ННК; сопротивление находилось как обратная величина к проводимости.

1.2. Поверхностные состояния и параметр газового воздействия

Влияние газа на поверхность ННК описывалось через изменение плотности заряженных состояний на боковой поверхности ННК, влияющих на форму областей пространственного заряда (ОПЗ), которые перезаряжаются под влиянием газа. В качестве количественной характеристики, описывающей данное изменение, был введен параметр – относительный фактор влияния газа:

$$g = \frac{N_T - N_{T0}}{N_{T0}}, \qquad (1)$$

где N_T – концентрация поверхностных состояний с учетом воздействия газа; N_{T0} – концентра-

Таблица 1 / Table 1

Параметры полупроводниковых материалов, используемые в расчетах [13, 14]

Parameters of semiconductor materials used in the calculations [13, 14]

Параметр / Parameter		Материал / Material		
Обозначение / Symbol	Наименование, ед. изм. / Name, units	GaP	GaAs	InAs
E_g	Запрещённая зона, эВ / Band gap, eV	2.26	1.424	0.354
χ	Энергия электронного сродства, эВ / Electron affinity energy, eV	3.8	4.07	4.9
N_c	Плотность состояний в зоне проводимости, $см^{-3}$ / Density of states in the conduction band, cm^{-3}	$1.8{\cdot}10^{19}$	$4.7{\cdot}10^{17}$	$9.33{\cdot}10^{16}$
N_v	Плотность состояний в валентной зоне, $см^{-3}$ / Density of states in the valence band, cm^{-3}	$1.9{\cdot}10^{19}$	$7.0{\cdot}10^{18}$	$8.12{\cdot}10^{18}$
μ_n	Подвижность электронов, $см^2{\cdot}В^{-1}{\cdot}с^{-1}$ / Electron mobility, $cm^2{\cdot}V^{-1}{\cdot}s^{-1}$	200	3750	10000
μ_p	Подвижность дырок, $см^2{\cdot}В^{-1}{\cdot}с^{-1}$ / Hole mobility, $cm^2{\cdot}V^{-1}{\cdot}s^{-1}$	150	400	500
ε	Статическая диэлектрическая проницаемость / Static permittivity	11.1	12.9	15.15

ция поверхностных состояний без учета воздействия газа.

Значения параметра g варьировались в диапазоне от – 0.5 до +0.5. Положительные значения g соответствуют увеличению эффективной концентрации поверхностных состояний по сравнению с исходным состоянием, тогда как отрицательные значения g – ее уменьшению. В рамках предлагаемой модели параметр g рассматривается как обобщенная характеристика воздействия газовой среды на поверхность ННК, то есть как эффективная мера изменения плотности поверхностных состояний и связанного с ней поверхностного заряда. Конкретный знак и величина g зависят от химической природы газа и механизма его взаимодействия с поверхностью: адсорбция может как увеличивать число электрически активных поверхностных состояний, так и приводить к их частичной пассивации. Поэтому в работе параметр g используется не для описания конкретного аналита, а для построения параметрических карт отклика, пригодных для сравнительного анализа различных материалов и режимов работы сенсора. Таким образом, при анализе карт значение $g < 0$ следует интерпретировать как режим уменьшения эффективного вклада поверхностных состояний, а значение $g > 0$ – как режим его усиления.

Расчет заселенности поверхностных состояний проводился в рамках самосогласованной схемы, в которой поверхностный заряд определялся заполнением ловушечного уровня по статистике Ферми–Дирака:

$$\sigma = Z \cdot e \cdot N_{T0} \cdot (1+g) \cdot F(-Z \cdot \Delta E). \qquad (2)$$

Здесь e – заряд электрона; N_{T0} – концентрация поверхностных состояний (берется из литературных данных, размерность – $см^{-2}$); g – относительный фактор влияния газа g.

Знак поверхностного заряда задавался функцией

$$Z = 1 + \frac{1}{2}(\mathrm{sgn}(E_T) - 1) \cdot (\mathrm{sgn}(N_D) + 1), \qquad (3)$$

зависящей от положения уровня поверхностных состояний и типа проводимости материала. Здесь E_T – положение уровня ловушек относительно начала зоны проводимости (берется в джоулях из литературных данных); N_D (размерность – $см^{-3}$) – степень легирования электронами (отрицательная, если легируют дырками). Такая запись позволяет в единой форме учитывать как случаи захвата электронов поверхностными состояниями, так и их эмиссию, соответствующую положительному поверхностному заряду.

В функции распределения Ферми – Дирака,

$$F(\Delta E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right) + 1}, \qquad (4)$$

величина $\Delta E = E_T + E_C - E_F$ – положение уровня ловушек относительно уровня Ферми (E_C – энергия нижнего уровня зоны проводимости; E_F – энергия уровня Ферми); k – постоянная Больцмана; T – температура (300 K)).

1.3. Расчет проводимости и газовой чувствительности

Проводимость на единицу длины считалась как

$$G_{\text{уд}} = e \cdot (n_e \mu_e + n_h \mu_h), \quad (5)$$

где n_e и n_h – концентрации электронов и дырок соответственно; μ_e и μ_h – подвижности электронов и дырок соответственно. В поперечном сечении посередине ННК считалось среднее значение $< G_{\text{уд}} >$ проводимости на единицу длины (5), которое затем перемножалось на длину ННК для получения проводимости ННК G. Сопротивление считалось как обратная величина к проводимости. Относительная газовая чувствительность определялась как

$$S = \frac{|G - G_{g=0}|}{G_{g=0}}, \quad (6)$$

где G – проводимость с учетом воздействия газа; $G_{g=0}$ – проводимость без учета воздействия газа.

2. Результаты

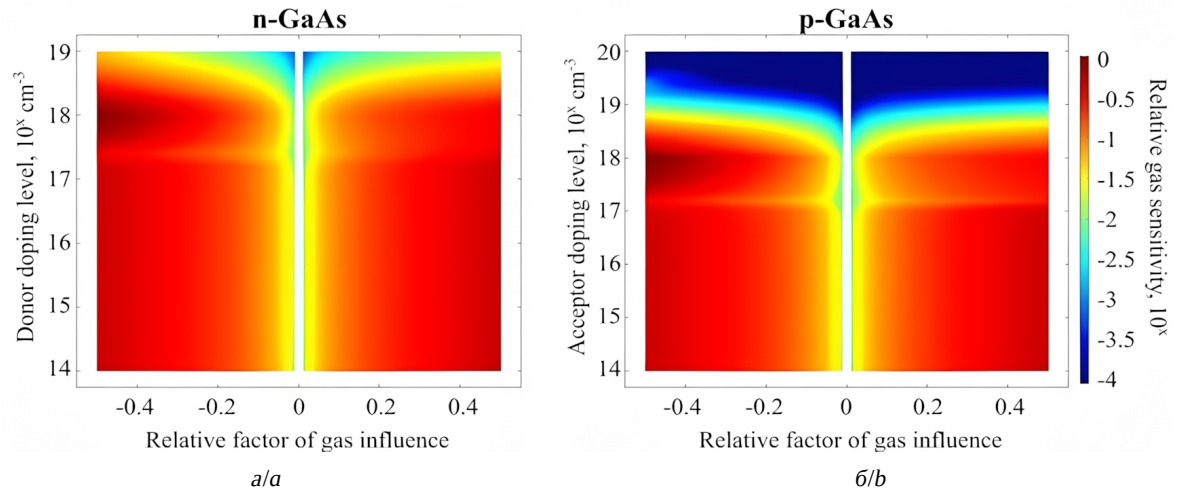
Для каждого материала (GaAs, InAs и GaP) были рассчитаны зависимости газовой чувствительности S и сопротивления R от степени легирования и параметра газового воздействия g, определяемого в (1), для диаметров ННК 50, 100, 150 и 200 нм при n- и p-типах проводимости. Поскольку общий характер изменения чувствительности при варьировании параметров сохраняется для всех рассмотренных диаметров, в данном разделе для наглядности приведены карты газовой чувствительности для типичного промежуточного диаметра 100 нм. Анализ сопротивления используется как дополнительный критерий применимости найденных режимов, а его количественное сопоставление положено в основу сводной таблицы оптимальных параметров.

2.1. Нитевидные нанокристаллы GaAs

На рис. 1, *а, б* приведены карты зависимости относительной газовой чувствительности S от степени легирования и параметра g для ННК GaAs с диаметром 100 нм и n- и p-типом проводимости.

Для обоих типов проводимости наблюдается немонотонная зависимость чувствительности от уровня легирования: при малых концентрациях примеси изменение поверхностного заряда заметно влияет на проводимость, однако сопротивление ННК в этих режимах обычно превышает 10^9 Ом/мкм, что затрудняет практическое использование одиночного сенсора.

Для n-GaAs максимум чувствительности при диаметре 100 нм достигается при концентрациях доноров порядка 10^{17}–10^{18} см$^{-3}$, преимущественно при отрицательных значениях g, что соответствует уменьшению эффективной плотности поверхностных состояний. Для p-GaAs аналогичная область повышенной чувствительности реализуется при концентрациях акцепто-



а/a *б/b*

Рис. 1. Карты зависимости относительной газовой чувствительности от характеристики относительного влияния газа на поверхностные состояния n-типа (*а*) и p-типа (*б*) проводимости ННК GaAs и уровня легирования ННК (диаметр ННК 100 нм) (цвет онлайн)

Fig. 1. Maps of the dependence of the relative gas sensitivity on the characteristic of the relative influence of gas on the surface states of n-type (*a*) and p-type(*b*) GaAs NWs and the doping level of NWs for a diameter of 100 nm (color online)

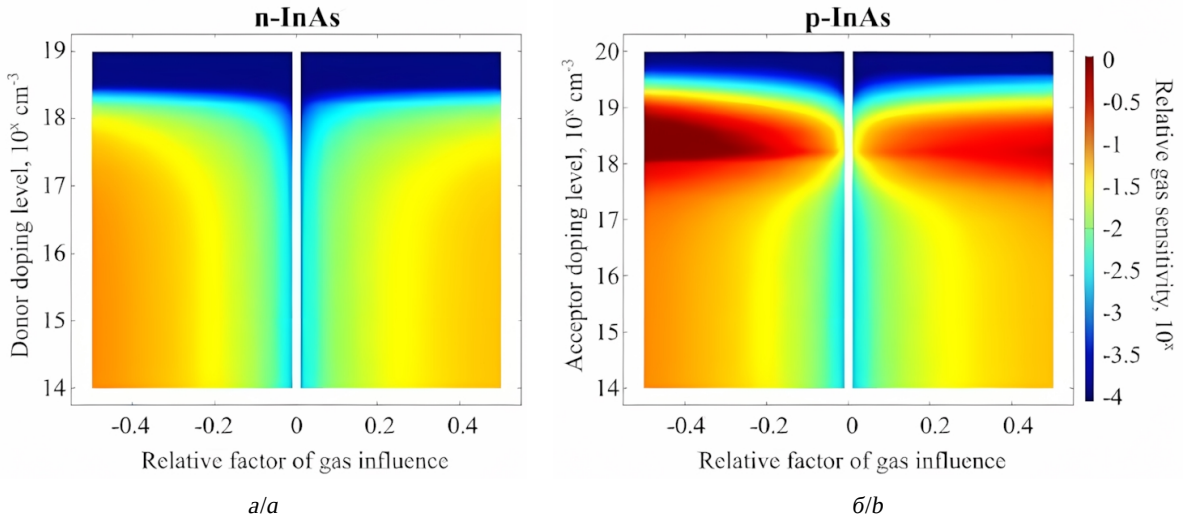
ров порядка 10^{17}–10^{18} см$^{-3}$. Чтобы объяснить появление максимума именно в промежуточной области легирования, необходимо детальнее рассмотреть условия формирования ОПЗ в ННК. При малых концентрациях примеси доминирующим фактором, влияющим на распределение носителей в сечении ННК, форму ОПЗ и в конечном итоге на проводимость являются поверхностные состояния, и так как молекулы газа влияют именно на них, то картина при низких концентрациях фактически не зависит от уровня легирования. Эффект от воздействия, при этом, определяется параметром g и фактической базовой плотностью состояний. При больших концентрациях, напротив, свободные заряды и ионные остовы в объеме ННК являются основным источником поля ОПЗ, а влияние поверхности выражено слабо. Так как молекулы газа напрямую не влияют на свободные заряды, а вклад поверхностных состояний монотонно снижается с ростом уровня легирования, то аналогичный эффект наблюдается и на построенных картах. В свою очередь, ситуация промежуточного уровня легирования представляет пограничную ситуацию баланса между поверхностным и объемным зарядами, при котором возникает конкуренция между ними: свободные носители заряда в объеме ННК стремятся компенсировать электрическое поле от поверхностных состояний, что приводит одновременно к значительному падению эффективного уровня поверхностных состояний и в то же время, недостаточно быстрому росту проводимости ННК. За счет этой комбинации факторов изменение плотности заряженных поверхностных состояний под действием влияния газа оказывает более выраженное влияние на проводимость системы, что и видно на картах.

Важно, что в рассмотренном диапазоне параметра g положение области оптимального легирования изменяется слабо, хотя величина отклика S (см. (6)) и его асимметрия по знаку g могут заметно меняться. Это означает, что оптимальный уровень легирования определяется прежде всего соотношением поверхностного и объемного вкладов в проводимость и потому слабо зависит от конкретной величины газового воздействия, задаваемой параметром g.

Таким образом, для ННК GaAs существует достаточно широкая область параметров, в которой удается совместить заметную газовую чувствительность с сопротивлением, остающимся в пределах, допустимых для измерений. Это позволяет рассматривать GaAs как перспективный материал для реализации одиночных сенсорных структур, ориентированных на получение относительно большого изменения проводимости при воздействии газа.

2.2. Нитевидные нанокристаллы InAs

На рис. 2, *а, б* представлены карты зависимости относительной газовой чувствительности S от степени легирования и параметра g для ННК



а/a *б/b*

Рис. 2. Карты зависимости относительной газовой чувствительности от характеристики относительного влияния газа на поверхностные состояния *n*-типа (*а*) и *p*-типа (*б*) проводимости ННК InAs и уровня легирования ННК (диаметр ННК 100 нм) (цвет онлайн)

Fig. 2. Maps of the dependence of the relative gas sensitivity on the characteristic of the relative influence of gas on the surface states of *n*-type (*a*) and *p*-type (*b*) conductivity of InAs NWs and the doping level of NWs (NW diameter 100 nm) (color online)

InAs диаметром 100 нм с *n*- и *p*-типами проводимости. В отличие от GaAs, для InAs влияние поверхностных состояний на транспорт сохраняется в более широком диапазоне уровней легирования, что связано с формированием приповерхностного слоя накопления заряда [7–9]. С точки зрения полупроводниковых свойств эффект накопления заряда связан с тем, что уровень поверхностных состояний в данном материале лежит не в запрещенной зоне полупроводника, а в зоне проводимости. В связи с этим поверхностные состояния фактически являются эмиттерами свободных электронов. Поэтому добавление свободных электронов в InAs за счет его легирования должно приводить к еще большему смещению баланса в сторону доминирующего влияния объема ННК (свободных носителей) на ОПЗ и монотонному снижению чувствительности газового сенсора, что и наблюдается в моделировании для *n*-InAs.

Одновременно сопротивление в рабочих областях остается существенно ниже, чем для ННК GaAs, что является важным преимуществом InAs при использовании одиночных ННК в качестве чувствительного элемента.

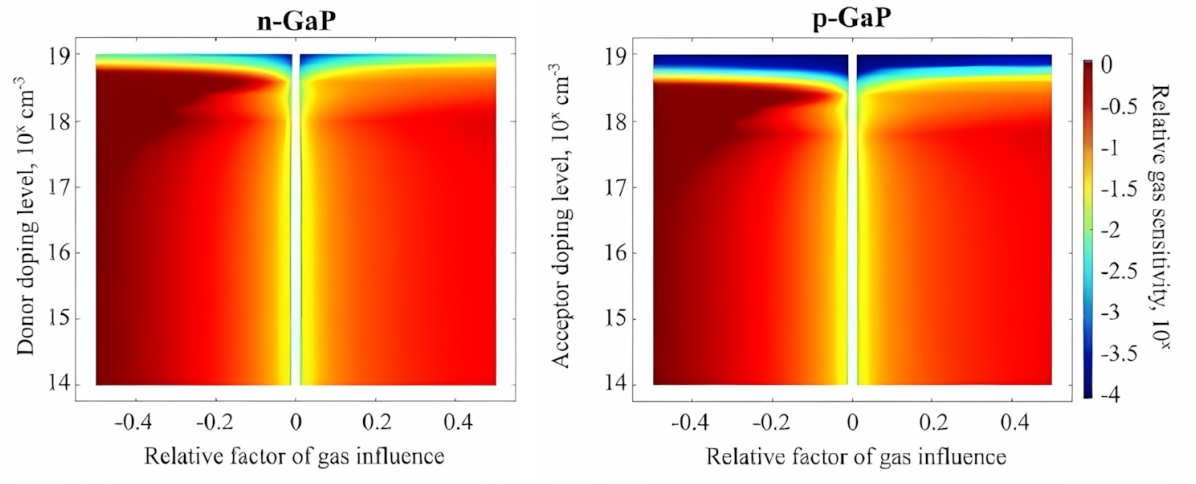
Для *p*-InAs, в противовес случаю для *n*-InAs, наблюдается область значительного повышения чувствительности при умеренных концентрациях акцепторов (10^{18}–10^{19} см$^{-3}$). Узкий пик чувствительности в этой области, как и в случае GaAs, связан с конкуренцией поверхностного и объемного вкладов в проводимость с той лишь разницей, что для InAs присутствие свободных электронов с поверхностных состояний требует увеличенной концентрации дырок для их компенсации. Стоит отметить, что сопротивление ННК остается относительно низким при значительном уровне чувствительности, что делает *p*-InAs перспективным материалом для сенсорных схем с высокой проводимостью чувствительного канала при умеренном отклике.

В целом ННК InAs характеризуются более широким набором практически пригодных режимов по сравнению с GaAs за счет сочетания заметной чувствительности и сравнительно низкого сопротивления. Особенно благоприятным выглядит *p*-тип проводимости, для которого поверхностный вклад в транспорт наиболее выражен.

2.3. Нитевидные нанокристаллы GaP

На рис. 3, *а, б* представлены карты зависимости относительной газовой чувствительности *S* от степени легирования и параметра *g* для ННК GaP диаметром 100 нм с *n*- и *p*-типами проводимости. По сравнению с GaAs и InAs для ННК GaP характерен более узкий диапазон параметров, в котором высокая чувствительность сочетается с сопротивлением, пригодным для практических измерений.

Для *n*-GaP при высоких концентрациях доноров на картах чувствительности формируются



а/*a* *б*/*b*

Рис. 3. Карты зависимости относительной газовой чувствительности от характеристики относительного влияния газа на поверхностные состояния *n*-типа (*а*) и *p*-типа (*б*) проводимости ННК GaP и уровня легирования ННК (диаметр ННК 100 нм) (цвет онлайн)

Fig. 3. Maps of the dependence of the relative gas sensitivity on the characteristic of the relative influence of gas on the surface states of *n*-type (*a*) and *p*-type (*b*) conductivity of GaP NWs and the doping level of NWs (NW diameter 100 nm) (color online)

области заметного отклика, а сопротивление снижается до измеримого диапазона. Однако полезное окно параметров остается сравнительно узким, поскольку области максимальной чувствительности и области приемлемого сопротивления перекрываются лишь частично. Для *p*-типа наблюдается схожая картина, обусловленная соизмеримыми эффективными массами для электронов и дырок в непрямозонном GaP.

Следовательно, ННК GaP уступают GaAs и InAs по универсальности как материал для одиночных газовых сенсоров. Их использование возможно, но требует более жесткого выбора диаметра и уровня легирования, чтобы обеспечить приемлемые электрические характеристики при сохранении заметной чувствительности.

Полученные для отдельных материалов закономерности позволяют перейти к их сводному сопоставлению по критериям газовой чувствительности и сопротивления, которое приведено в следующем разделе.

3. Обсуждение результатов

Для количественного сравнения различных материалов и типов проводимости в табл. 2 приведены оптимальные параметры ННК (материал с указанием типа проводимости, диаметр, диапазон легирования, соответствующий максимальной газовой чувствительности S при допустимом уровне сопротивления, а также значения чувствительности и сопротивления в исходном и оптимальном состояниях). Таблица построена по результатам анализа карт, обсужденных выше, и позволяет оценить, какие комбинации материала, диаметра и легирования наиболее целесообразны для реализации одиночных ННК-сенсоров при комнатной температуре.

Из табл. 2 следует, что при переходе от нелегированных ННК к оптимально легированным структурам газовая чувствительность в ряде случаев существенно возрастает, однако практическая ценность этого роста определяется не только величиной S, но и соответствующим сопротивлением ННК. Широкие интервалы сопротивления, указанные для некоторых материалов при фиксированных диаметре и уровне легирования, обусловлены изменением параметра газового воздейств g. Поскольку проводимость канала в режиме частичного обеднения экспоненциально зависит от величины изгиба энергетических зон, линейная модуляция плотности заряженных поверхностных состояний при воздействии газа приводит к существенному изменению сопротивления. Значения чувствительности, приведенные в табл. 2 для оптимального легирования, соответ-

Таблица 2 / Table 2

Оптимальные параметры нитевидных нанокристаллов
Optimal parameters of nanowires

ННК / NWs	Диаметр, нм / Diameter, nm	Оптимальная степень легирования, $см^{-3}$ / Optimum alloying level, cm^{-3}	Газовая чувствительность, отн. ед. / Gas sensitivity, p.u.		Сопротивление, Ом/мкм / Resistance, Ohm/μm	
			Нелегированный ННК / Unalloyed NWs	Оптимальная степень легирования / Optimum alloying level	Нелегированный ННК / Unalloyed NWs	Оптимальная степень легирования / Optimum alloying level
p-GaAs	50	$4{\cdot}10^{18}$	0.3	1	$> 10^9$	10^8–10^9
	200	$2{\cdot}10^{17}$	0.3	1	$> 10^9$	10^8–10^9
n-GaAs	50	$4{\cdot}10^{18}$	0.3	1	10^8	10^8–10^9
	200	$3{\cdot}10^{17}$	0.3	1	$3{\cdot}10^8$	10^8–10^9
p-InAs	50	$6{\cdot}10^{18}$	0.1	> 1	< 1	$4{\cdot}10^4$
	200	$5{\cdot}10^{17}$	0.05	> 1	< 1	10^4
n-InAs	50	$< 10^{18}$	0.1	0.1	2	2
	200	$< 2 \cdot 10^{17}$	0.04	0.04	10	10
p-GaP	50	10^{19}	Нет решения / No solution	0.06	Нет решения / No solution	60
	200	Нет решения (отсутствует сходимость численного решения в пакете COMSOL) / No solution (no convergence of the numerical solution in the COMSOL package)				
n-GaP	50	$6{\cdot}10^{18}$	0.5	> 1	$> 10^9$	10^3–10^8
	200	10^{18}, $2{\cdot}10^{17}$	0.5	1.1	$> 10^9$	10^4–10^5, $> 10^9$

ствуют наибольшим по модулю значениям параметра g в пределах рассмотренного диапазона и, как правило, достигаются при отрицательных g, то есть при уменьшении эффективной плотности поверхностных состояний. Для ННК GaAs при оптимальном легировании достигаются значения S порядка единицы, однако сопротивление при этом остается близким к верхней границе диапазона, удобного для электрических измерений. ННК InAs, особенно p-типа, характеризуются низкими значениями сопротивления и более широким набором практически пригодных режимов, хотя их чувствительность в части режимов оказывается ниже, чем у GaAs. Для ННК GaP (прежде всего n-типа) возможны высокие значения S однако они реализуются в весьма узких областях параметров. Таким образом, наиболее сбалансированными материалами для реализации газовых сенсоров на основе ННК следует считать GaAs и InAs, тогда как GaP представляет интерес как более специализированная система, требующая более точной оптимизации диаметра и уровня легирования.

Полученные зависимости показывают, что оптимальные режимы работы ННК-сенсора формируются в области, где вклад поверхностного заряда в проводимость становится сопоставимым с вкладом объемного легирования. При малых концентрациях примеси проводимость в основном определяется поверхностными состояниями, поэтому газовое воздействие заметно влияет на отклик, но сопротивление ННК часто оказывается слишком высоким. При высоких уровнях легирования, напротив, проводимость в большей степени определяется объемными носителями, и относительное влияние поверхности ослабевает. Именно этим объясняется появление промежуточных диапазонов легирования, наиболее перспективных для сенсорных применений.

Следует подчеркнуть, что предложенная модель носит обобщенный характер. Воздействие газа задается через безразмерный параметр g, соответствующий относительному изменению концентрации поверхностных состояний. Поэтому полученные результаты следует интерпретировать как параметрические карты газовой чувствительности, а не как количественный прогноз отклика на конкретный газ. Такая постановка удобна для предварительного сравнительного анализа материалов и выбора перспективных диапазонов диаметра и легирования, однако она не учитывает химическую селективность поверхности, кинетику адсорбции и десорбции, а также возможное влияние контактных областей. Предложенный в статье подход позволяет сопоставить материалы GaAs, InAs и GaP и выделить области параметров, наиболее перспективные для реализации одиночных ННК-сенсоров. Разработанная модель может служить инструментом предварительной оптимизации сенсорных структур и постановки последующих более детализированных расчетов и экспериментов.

Заключение

В работе проведено численное моделирование газовой чувствительности одиночных нитевидных нанокристаллов GaAs, InAs и GaP с n- и p-типами проводимости в диапазоне диаметров 50–200 нм и широком интервале степеней легирования при комнатной температуре. Разработанная двумерная аксимметричная модель с явным учетом поверхностных состояний позволила проследить влияние материала, диаметра, типа проводимости и уровня легирования на проводимость, сопротивление и газовую чувствительность ННК.

Показано, что максимальная газовая чувствительность для всех рассмотренных материалов достигается в промежуточных диапазонах легирования, где реализуется конкуренция между поверхностным зарядом, определяющим перестройку проводящего канала, и объемным легированием, определяющим проводимость ННК. Введение безразмерного параметра g, описывающего относительное изменение концентрации поверхностных состояний, позволило построить параметрические карты газовой чувствительности и провести единое сопоставление различных материалов и геометрий.

Установлено, что ННК GaAs как при n-, так и при p-типе проводимости обеспечивают заметный относительный отклик и представляют интерес как материал для сенсоров, ориентированных на получение выраженного изменения проводимости.

ННК InAs характеризуются более низким сопротивлением и более широким диапазоном практически пригодных режимов, тогда как для ННК GaP область параметров, одновременно оптимальных по чувствительности и сопротивлению, оказывается заметно уже.

Полученные результаты могут быть использованы для предварительного выбора материала, диаметра и уровня легирования при проектировании газочувствительных структур на основе

ННК полупроводников A^3B^5. Дальнейшее развитие модели целесообразно связать с явным учетом химии взаимодействия газа с поверхностью, зависимости параметра g от состава и давления газовой среды, а также влияния контактных областей и массивов ННК, что позволит перейти от универсального сравнительного анализа к более количественному описанию отклика сенсорной структуры.

Список литературы / References

1. Varghese S. S., Lonkar S., Singh K. K., Swaminathan S., Abdala A. Recent advances in graphene based gas sensors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2015, vol. 218, pp. 160–183. https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.04.062
2. Degler D., Weimar U., Barsan N. Current understanding of the fundamental mechanisms of doped and loaded semiconducting metal-oxide-based gas sensing materials. *CS Sensors*, 2019, vol. 4, iss. 9, pp. 2228–2249. https://doi.org/10.1021/acssensors.9b00975
3. Rai A., Lal R. *Chemical gas sensors based on nanowires*. Available at: https://www.researchgate.net/publication/1921687_Chemical_Gas_Sensors_Based_On_Nanowires (accessed July 17, 2926)
4. Kolmakov A., Moskovits M. Chemical sensing and catalysis by one-dimensional metal-oxide nanostructures. *Annual Review of Materials Research*, 2004, vol. 34, pp. 151–180. https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.040203.112141
5. Shkir M. Development of a smart ammonia gas sensor based on Ce-doped CdSe thin films. *Optical Materials*, 2025, vol. 167, art. 117254. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2025.117254
6. Du J., Liang D., Tang H., Gao X. P. A. InAs nanowire transistors as gas sensor and the response mechanism. *Nano Letters*, 2009, vol. 9, iss. 12, pp. 4348–4351. https://doi.org/10.1021/nl902611f
7. Offermans P., Crego-Calama M., Brongersma S. H. Gas detection with vertical InAs nanowire arrays. *Nano Letters*, 2010, vol. 10, iss. 7, pp. 2412–2415. https://doi.org/10.1021/nl1005405
8. Demontis V., Rocci M., Donarelli M., Maiti R., Zannier V., Beltram F., Sorba L., Roddaro S. Conductometric sensing with individual InAs nanowires. *Sensors*, 2019, vol. 19, iss. 13, art. 2994. https://doi.org/10.3390/s19132994
9. Baratto C., Musaev E., Demontis V., Luin S., Zannier V., Sorba L., Faglia G., Rovati L., Rossella F. InAs nanowire-based twin electrical sensors enabling simultaneous gas detection measurements: Nanodevice engineering, testing and signal fluctuation analysis. *ACS Applied Nano Materials*, 2025, vol. 8, iss. 20, pp. 10275–10286. https://doi.org/10.1021/acsanm.4c07238
10. Wei Sh., Li Z., Karawdeniya B. I., Chen C., Tan H. H., Jagadish C., Qiu L., Fu L. III–V compound semiconductor nanowire arrays for sensor applications: A review. *ACS Sensors*, 2025, vol. 10, iss. 8, pp. 5339–5362. https://doi.org/10.1021/acssensors.5c00526
11. Comini E. Integration of metal oxide nanowires in flexible gas sensing devices. *Sensors*, 2013, vol. 13, iss. 8, pp. 10659–10673. https://doi.org/10.3390/s130810659
12. Wei S., Li Z., John A., Karawdeniya B. I., Li Z., Zhang F., Vora K., Tan H. H., Jagadish C., Murugappan K., Tricoli A., Fu L. Semiconductor nanowire arrays for high-performance miniaturized chemical sensing. *Advanced Functional Materials*, 2022, vol. 32, iss. 5, art. 2107596. https://doi.org/10.1002/adfm.202107596
13. Adachi S. *Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*. John Wiley & Sons, 2005. 416 p. https://doi.org/10.1002/0470090340
14. *NSM Archive Physical Properties of Semiconductors*. Available at: https://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/ (accessed May 26, 2026).

Поступила в редакцию 30.04.2026; одобрена после рецензирования 29.05.2026;
принята к публикации 17.06.2026; опубликована 30.09.2026

The article was submitted 30.04.2026; approved after reviewing 29.05.2026;
accepted for publication 17.06.2026; published 30.09.2026