



<http://dx.doi.org/10.35596/1729-7648-2020-18-8-62-68>

Оригинальная статья  
Original paper

УДК 621.382.323

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕНСОРОВ ТОКСИЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРНОГО ПОЛЕВОГО ТРАНЗИСТОРА

ВОЛЧЁК В.С., СТЕМПИЦКИЙ В.Р.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
(г. Минск, Республика Беларусь)*

*Поступила в редакцию 19 ноября 2020*

© Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2020

**Аннотация.** Значительный рост массового производства продукции, в составе которой используются наночастицы, вызывает беспокойство по причине обнаружения их токсичного воздействия на живые организмы. Стандартным методом анализа токсичности веществ, в том числе наноматериалов, является токсикологическое тестирование, которое требует больших затрат материальных и временных ресурсов. Альтернативным подходом считается разработка моделей, которые позволяют прогнозировать влияние наноматериалов на биологические системы. В обоих случаях для детектирования наночастиц требуется эффективный электронный комплекс, состоящий из высокочувствительного сенсора и системы приема, обработки и передачи данных. В настоящее время активно ведутся фундаментальные и прикладные исследования, направленные на применение гетероструктурных полевых транзисторов (транзисторов с высокой подвижностью электронов) в качестве базы таких сенсоров. Цель данной работы – разработка методики компьютерного моделирования сенсоров токсичных наночастиц на базе гетероструктурного полевого транзистора. Объект исследования – приборная структура нитрид-галлиевого транзистора с высокой подвижностью электронов. Предметом исследования являются электрические характеристики транзистора, рассчитанные в статическом режиме. Результаты расчетов показывают, что зависимость между концентрацией наночастиц в исследуемой среде и поверхностной плотностью поляризационного заряда может быть использована в качестве основы методики компьютерного моделирования сенсоров токсичных наночастиц на базе гетероструктурного полевого транзистора. Преимущество предлагаемой методики состоит в использовании коэффициента масштабирования, предназначенного для калибровки плотности поляризационного заряда в соответствии с заданной концентрацией двумерного электронного газа. Полученные результаты могут быть использованы предприятиями электронной промышленности Республики Беларусь при разработке элементной базы сверхвысокочастотной электроники на основе нитрида галлия.

**Ключевые слова:** наночастица, токсичность, функциональный материал, нитрид галлия, транзистор с высокой подвижностью электронов, гетероструктура, сенсор, моделирование.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Благодарности.** Работа выполнена в рамках задания 1.2.23 Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Информатика, космос и безопасность», подпрограмма «Информатика и космические исследования».

**Для цитирования.** Волчѐк В.С., Стемпицкий В.Р. Компьютерное моделирование сенсоров токсичных наночастиц на основе гетероструктурного полевого транзистора. Доклады БГУИР. 2020; 18(8): 62-68.

## NUMERICAL SIMULATION OF THE SENSOR FOR TOXIC NANOPARTICLES BASED ON THE HETEROSTRUCTURE FIELD-EFFECT TRANSISTOR

VLADISLAV S. VOLCHECK, VIKTOR R. STEMPIISKY

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (Minsk, Republic of Belarus)*

*Submitted 19 November 2020*

© Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 2020

**Abstract.** A significant rise in the mass production of products that contain nanoparticles is of growing concern due to the detection of their toxic effects on living organisms. The standard method for analyzing the toxicity of substances, including nanomaterials, is toxicological testing, which requires the substantial consumption of time and material resources. An alternative approach is to develop models that predict the effect of nanomaterials on biological systems. In both cases, for the detection of nanoparticles an effective electronic complex consisting of a sensor with high sensitivity and a data reception/processing/transmission system is necessary. In recent times, fundamental and applied research activities aimed at the application of heterostructure field-effect transistors – high electron mobility transistors – as a base for such sensors have been undertaken. The purpose of this work is to develop a technique for modeling a sensor for toxic nanoparticles based on the heterostructure field-effect transistor. The object of the research is a gallium nitride high electron mobility transistor device structure. The subject of the research is the electrical characteristics of the transistor obtained in static mode. The calculation results show that the dependence between the concentration of the toxic nanoparticles in the test medium and the polarization charge surface density could serve as a base for modeling the sensor for toxic nanoparticles based on the heterostructure field-effect transistor. The primary advantage of the proposed technique is the use of the scaling parameter intended directly for calibrating the polarization charge density in accordance with the two-dimensional electron gas concentration. The obtained results can be utilized by the electronics industry of the Republic of Belarus for developing the hardware components of gallium nitride high-frequency electronics.

**Keywords:** nanoparticle, toxicity, functional material, gallium nitride, high electron mobility transistor, heterostructure, sensor, simulation.

**Conflict of interests.** The authors declare no conflict of interests.

**Gratitude.** This work was performed as a part of the assignment 1.2.23 of the State Research Programs of the Republic of Belarus “Informatics, Space and Safety”, subprogram “Informatics and Space Research”.

**For citation.** Volcheck V.S., Stempitsky V.R. Numerical simulation of the sensor for toxic nanoparticles based on the heterostructure field-effect transistor. Doklady BGUIR. 2020; 18(8): 62-68.

### Введение

В настоящее время активно ведутся фундаментальные и прикладные исследования в области изучения влияния наноразмерных частиц (наночастиц) на живые организмы, а также их токсичности [1, 2]. Это связано со значительным ростом массового производства продукции, в составе которой применяются наноматериалы, в том числе наночастицы.

Традиционным методом анализа токсичности веществ, в том числе наноматериалов, является токсикологическое тестирование, требующее существенных затрат материальных и временных ресурсов [3]. Альтернативным подходом считается разработка моделей, которые позволяют прогнозировать влияние наноматериалов на биологические системы по результатам учета определенного набора признаков [3, 4]. В любом случае для детектирования наночастиц требуется эффективный электронный комплекс, состоящий из высокочувствительного сенсора и системы приема, обработки и передачи данных.

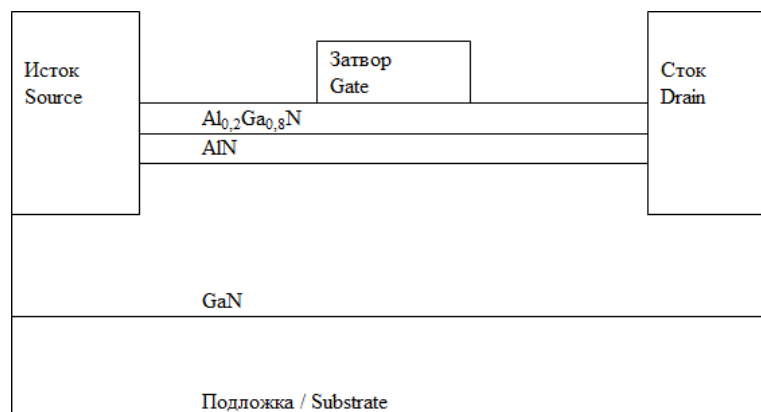
В рамках доступных, в том числе и в Республике Беларусь, технологических процессов сенсоры изготавливаются на основе полевых транзисторов. Роль детектирующей (активной)

области сенсора выполняет затвор, который формируется из функционального материала, активно взаимодействующего с исследуемой средой (наночастицами) и обладающего высокой селективностью к детектируемым частицам. В последние годы активно ведутся исследования, направленные на применение в качестве основы таких сенсоров гетероструктурных полевых транзисторов (транзисторов с высокой подвижностью электронов, ТВПЭ), что объясняется их превосходными эксплуатационными характеристиками [5].

В статье предлагается методика компьютерного моделирования сенсоров токсичных наночастиц, формируемых на базе ТВПЭ, в основе которой лежит применение зависимости поверхностной плотности поляризационного заряда (а, следовательно, также концентрации двумерного электронного газа и тока стока) от концентрации наночастиц в анализируемой среде. Основное преимущество этой методики заключается в задействовании коэффициента масштабирования, предназначенного для калибровки плотности поляризационного заряда в соответствии с заданной концентрацией двумерного электронного газа.

### Структура

Объектом исследования является приборная структура ТВПЭ на основе нитрида галлия (GaN), которая схематически показана на рис. 1. Толщины сапфировой подложки, буферного слоя GaN, спейсера на основе нитрида алюминия (AlN) и барьерного слоя  $Al_{0,2}Ga_{0,8}N$  равны 20 мкм, 1,5 мкм, 2 нм и 20 нм соответственно. Длина затвора равна 4 мкм. Расстояния затвор-исток и затвор-сток одинаковы (5 мкм). Ширина приборной структуры ( $W$ ) составляет 100 мкм.



**Рис. 1.** Приборная структура ТВПЭ на основе GaN  
**Fig. 1.** Device structure of the GaN-based high electron mobility transistor

Функциональный материал затвора подбирается в соответствии с типом токсичных наночастиц, который прибор должен обнаруживать [6]. Например, затвор на основе золота с тиогликолевой кислотой используется в сенсорах ионизированных наночастиц ртути и меди [7].

### Методика моделирования

Моделирование поляризационных эффектов, возникающих в приборах на основе GaN, имеет критический характер. При расчете поляризации пространственная плотность заряда в уравнении Пуассона, которое решается в узлах вычислительной сетки, находящихся на гетероинтерфейсе (границе между материалами гетероперехода), изменяется на величину заряда, индуцированного поляризациями.

В двойной гетероструктуре AlGa<sub>0,2</sub>N/AlN/GaN суммарная спонтанная поляризация определяется как разность соответствующих величин двух смежных материалов:

$$P_{sp}^{AlGaN/AlN} = P_{sp}^{AlN} - P_{sp}^{AlGaN}, \quad (1)$$

$$P_{sp}^{AlN/GaN} = P_{sp}^{GaN} - P_{sp}^{AlN}. \quad (2)$$

Пьезоэлектрическая поляризация равняется

$$P_{pe}^{AlN/GaN} = 2 \left( \frac{a^{GaN} - a^{AlN}}{a^{AlN}} \right) \left( e_{31}^{AlN} - e_{33}^{AlN} \frac{c_{13}^{AlN}}{c_{33}^{AlN}} \right), \quad (3)$$

где  $a$  – постоянная решетки,  $e_{31}$  и  $e_{33}$  – пьезоэлектрические постоянные,  $c_{13}$  и  $c_{33}$  – постоянные упругости.

Необходимо отметить, что относительно толстый слой GaN считается ненапряженным, и пьезоэлектрическую составляющую для него можно не учитывать.

Наконец, суммарная поляризация определяется как разность между спонтанной и пьезоэлектрической составляющими:

$$P_{tot} = \sigma (P_{sp} - P_{pe}), \quad (4)$$

где  $\sigma$  – коэффициент масштабирования поляризационного заряда.

Значения параметров модели, использующейся при моделировании поляризации в гетероструктурах на основе системы материалов AlN/GaN, приведены в работе [8].

На поверхности барьерного слоя AlGaIn ТВПЭ присутствуют положительные заряды, индуцированные двумерным электронным газом. Даже небольшие изменения в исследуемой среде, в которой располагается транзистор, оказывают воздействие на поверхностный заряд и, как следствие, на концентрацию двумерного электронного газа, которая определяется как

$$n = \frac{\varepsilon}{qd} (V_{GS} - V_{th} - V_x), \quad (5)$$

где  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость AlGaIn,  $q$  – элементарный заряд,  $d$  – расстояние между затвором и двумерным электронным газом,  $V_{GS}$  – напряжение затвор-исток,  $V_{th}$  – пороговое напряжение и  $V_x$  – потенциал вдоль канала.

Ток стока рассчитывается следующим образом:

$$I = \frac{\varepsilon \mu W}{2ld} [2(V_{GS} - V_{th})V_{DS} - V_{DS}^2], \quad (6)$$

где  $\mu$  – подвижность электронов,  $l$  – расстояние между истоком и стоком и  $V_{DS}$  – напряжение сток-исток.

Уравнение (6) устанавливает связь между током стока и напряжением затвор-исток, которая зависит от характеристик двумерного электронного газа [9].

## Результаты моделирования

Приборное моделирование проводилось при следующих условиях:

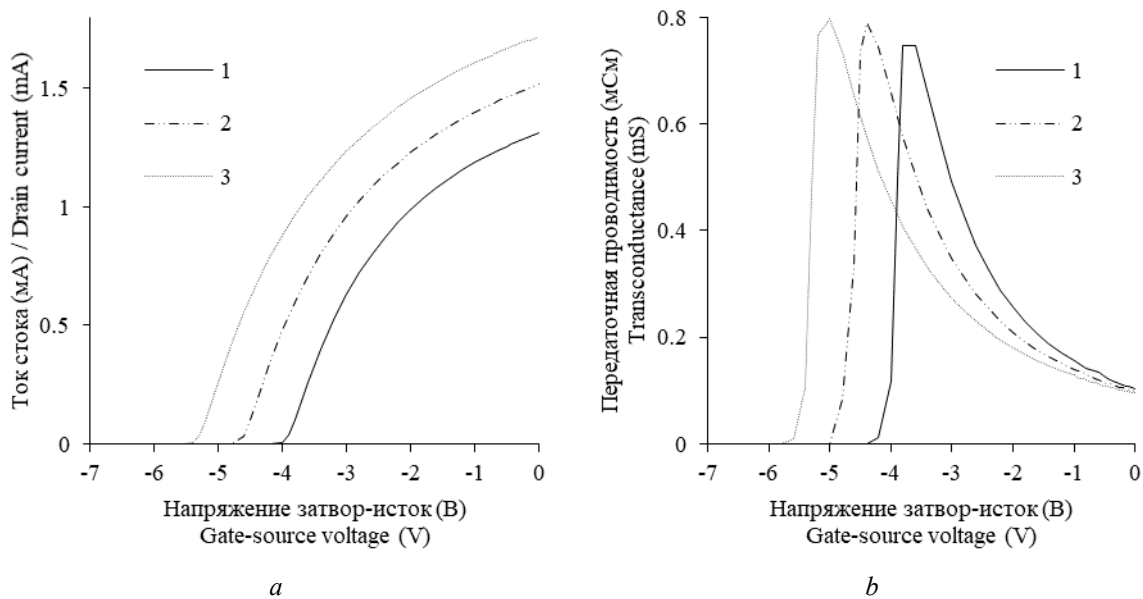
1. Концентрация донорной примеси в барьерном слое составляет  $10^{15} \text{ см}^{-3}$ .
2. В буферный слой внедрены акцепторные уровни глубокого залегания с энергией 0,7 эВ ниже дна зоны проводимости, играющие роль ловушечных состояний [10]. Распределение концентрации этих уровней от спейсера до подложки описывается функцией Гаусса с максимальной концентрацией  $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , располагающейся на расстоянии 0,3 мкм от подложки, и характеристической длиной 0,481 мкм.

3. Поверхностные ловушечные состояния не учитываются.

На рис. 2 представлены сток-затворные характеристики и зависимости передаточной проводимости (крутизны) от напряжения затвор-исток ( $V_{зи}$ ) ТВПЭ, используемого в качестве сенсора токсичных наночастиц, при различных значениях параметра  $\sigma$ . Напряжение сток-исток ( $V_{си}$ ) равно 0,1 В.

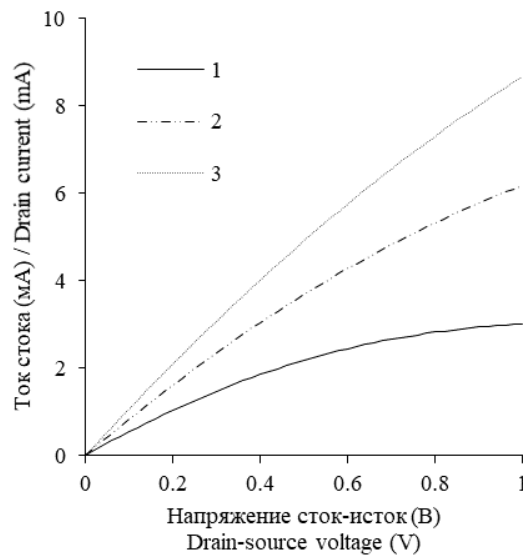
При уменьшении параметра  $\sigma$  со значения 0,9 до значения 0,7 поверхностная плотность поляризационного заряда в области канала снижается на 22,218 % со значения  $9,731 \cdot 10^{-6} \text{ Кл/см}^2$  до значения  $7,569 \cdot 10^{-6} \text{ Кл/см}^2$ . Результатом уменьшения плотности заряда является смещение порогового напряжения и максимального значения крутизны

в положительном направлении. Так, смещение порогового напряжения равно 1,388 В, что составляет 26,090 % от исходного значения  $-5,320$  В. При  $\sigma = 0,9$  максимальное значение крутизны (0,797 мСм) соответствует напряжению затвор-исток  $-4,8$  В, в случае же  $\sigma = 0,7$  пиковое значение крутизны (0,747 мСм) наблюдается при напряжении затвор-исток  $-3,6$  В.



**Рис. 2.** Входные характеристики ( $V_{DS} = 0,1$  В) при  $\sigma = 0,7$  (1); 0,8 (2) и 0,9 (3): *a* – сток-затворные характеристики; *b* – зависимости передаточной проводимости от напряжения затвор-исток  
**Fig. 2.** Input characteristics ( $V_{DS} = 0.1$  V) at  $\sigma = 0.7$  (1); 0.8 (2) and 0.9 (3): *a* – drain current vs. gate-source voltage; *b* – transconductance vs. gate-source voltage

На рис. 3 показаны сток-стоковые характеристики ( $V_{ZI} = -3$  В) при тех же значениях параметра  $\sigma$ .



**Рис. 3.** Сток-стоковые характеристики ( $V_{ZI} = -3$  В) при  $\sigma = 0,7$  (1); 0,8 (2) и 0,9 (3)  
**Fig. 3.** Drain current vs. drain-source voltage characteristics ( $V_{GS} = -3$  V) at  $\sigma = 0.7$  (1); 0.8 (2) and 0.9 (3)

При снижении поверхностной плотности поляризационного заряда путем изменения параметра  $\sigma$  концентрация электронов в области канала уменьшается на 85,683% со значения  $4,6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$  до значения  $6,6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . В результате уменьшение тока стока, рассчитанное при напряжениях затвор-исток и сток-сток  $-3$  и  $15$  В соответственно, составляет 5,658 мА, что равно 65,300 % от значения 8,664 мА, полученного при  $\sigma = 0,9$ . Сопоставление значений тока

стока ТВПЭ, измеренных в отсутствие и в присутствии целевых наночастиц, концентрация которых заранее известна, позволяет получить зависимость между этими величинами.

### Заключение

Предложена методика моделирования сенсоров токсичных наночастиц, формируемых на базе ТВПЭ, в основе которой лежит применение зависимости поверхностной плотности поляризационного заряда от концентрации наночастиц в анализируемой среде. Преимущество этой методики состоит в использовании коэффициента масштабирования, предназначенного для калибровки величины поляризационного заряда в соответствии с данной концентрацией двумерного электронного газа. Полученные результаты могут быть полезны при разработке элементной базы высокочастотной электроники предприятиями электронной промышленности Республики Беларусь.

### Список литературы / References

1. Sengul A.B., Asmatulu E. Toxicity of Metal and Metal Oxide Nanoparticles: A Review. *Environmental Chemistry Letters*. 2020;18:1659-1683. DOI: 10.1007/s10311-020-01033-6.
2. Lekamge S., Miranda A.F., Abraham A., Li V., Shukla R., Bansal V., Nuggeoda D. The Toxicity of Silver Nanoparticles (AgNPs) to Three Freshwater Invertebrates with Different Life Strategies: Hydra Vulgaris, Daphnia Carinata, and Paratya Australiensis. *Frontiers in Environmental Science*. 2018;6(152):1-13. DOI: 10.3389/fenvs.2018.00152.
3. Burello E., Worth A. Predicting Toxicity of Nanoparticles. *Nature Nanotechnology*. 2011;6:138-139. DOI: 10.1038/nnano.2011.27.
4. Puzyn T., Rasulev B., Gajewicz A., Hu X., Dasari T.P., Michalkova A., Hwang H.-M., Toropov A., Leszczynska D., Leszczynski J. Using Nano-QSAR to Predict the Cytotoxicity of Metal Oxide Nanoparticles. *Nature Nanotechnology*. 2011;6:175-178. DOI: 10.1038/nnano.2011.10.
5. Makowski M.S., Kim S., Gaillard M., Janes D., Manfra M.J., Bryan I., Sitar Z., Arellano C., Xie J., Collazo R., Ivanisevic A. Physisorption of Functionalized Gold Nanoparticles on AlGaIn/GaN High Electron Mobility Transistors for Sensing Applications. *Applied Physics Letters*. 2013;074102. DOI: 10.1063/1.4791788.
6. Abdel-Karim R., Reda Y., Abdel-Fattah A. Review—Nanostructured Materials-Based Nanosensors. *Journal of The Electrochemical Society*. 2020;167:037554. DOI: 10.1149/1945-7111/ab67aa.
7. Wang H.T., Kang B.S., Chancellor T.F., Lele T.P., Tseng Y., Ren F., Pearton S.J., Dabiran A., Osinsky A., Chow P.P. Selective Detection of Hg(II) Ions from Cu(II) and Pb(II) Using AlGaIn/GaN High Electron Mobility Transistors. *Electrochemical and Solid-State Letters*. 2007;10(11):J150-J153. DOI: 10.1149/1.2778997.
8. Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R. Band Parameters for III-V Compound Semiconductors and Their Alloys. *Journal of Applied Physics*. 2001;89(11):5815-5875. DOI: 10.1063/1.1368156.
9. Guo Y., Wang X., Miao B., Li Y., Yao W., Xie Y., Li J., Wu D., Pei R. An AuNPs-Functionalized AlGaIn/GaN High Electron Mobility Transistor Sensor for Ultra-sensitive Detection of TNT. *RSC Advances*. 2015;5(120):98724-98729. DOI: 10.1039/C5RA16704C.
10. Dao Dinh Ha, Trung Tran Tuan, Volcheck V., Stempitsky V. Iron-Induced Acceptor Centers in the Gallium Nitride High Electron Mobility Transistor: Thermal Simulation and Analysis. *2019 International Conference on Advanced Technologies for Communications (ATC)*. 2019:308-312. DOI: 10.1109/ATC.2019.8924506.

### Вклад авторов

Волчѣк В.С. определил составные элементы конструкции ТВПЭ, применяемого в качестве основы сенсора токсичных наночастиц; осуществил выбор и настройку методов и моделей, используемых при моделировании; выполнил серию расчетов электрических характеристик.

Стемпицкий В.Р. выполнил анализ современного состояния проблемы по теме работы, сформулировал цель и задачи исследований.

### Authors' contribution

Volcheck V.S. has chosen the components of the GaN high electron mobility transistor that is used as a sensor for toxic nanoparticles; has defined and adjusted the methods and models used in the simulation; has calculated the electrical characteristics.

Stempitsky V.R. has analyzed the current state of the problem and formulated the goals and objectives of the work.

#### Сведения об авторах

Волчѣк В.С., младший научный сотрудник НИЛ 4.4 «Компьютерное проектирование микро- и нанoeлектронных систем» НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Стемпіцкі В.Р., к.т.н., доцент, заместитель начальника НИЧ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

#### Information about the authors

Volcheck V.S., Research Assistant of the R&D Laboratory 4.4 "Computer-Aided Design of Micro- and Nanoelectronic Systems" of R&D Department of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

Stempitsky V.R., PhD, Associate Professor, Deputy Head of Research and Development Department of Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics.

#### Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,  
г. Минск, ул. П. Бровки, 6,  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники  
тел. +375-17-293-84-09;  
e-mail: vlad.volchek@bsuir.by  
Волчѣк Владислав Сергеевич

#### Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,  
Minsk, P. Brovka str., 6,  
Belarusian State University  
of Informatics and Radioelectronics  
tel. + 375-17-293-84-09;  
e-mail: vlad.volchek@bsuir.by  
Volcheck Vladislav Sergeevich