

# 양자 시뮬레이션을 통한 나노 CNT 소자에서의 p-n 접합 특성 연구

이여름, 최원철

한국과학기술원 전기 및 전자공학과, 대전광역시 305-701, 대한민국  
e-mail: yolum.lee@kaist.ac.kr

EDISON 나노물리 사이트에 탑재된 탄소나노튜브 FET 소자 시뮬레이션 툴을 이용하여 나노 CNT 소자에서의 p-n접합이 갖는 특성을 살펴보았다. 순방향 바이어스에서는 일반적인 p-n접합과 유사한 특성을 보이나 그 원리는 다를 수 있었으며, 역방향 바이어스에서는 밴드 대 밴드 터널링에 의한 전류가 발생함을 확인하였다. 또한 이러한 역방향 바이어스 하의 전류가 도핑농도에 따라 변함을 확인하여 실제 CNT 소자의 도핑농도를 예측해볼 수 있는 가능성을 확인하였다.

## INTRODUCTION

모스펫 (MOSFETs)과 같은 전자 소자를 구성함에 있어서 p-n접합은 가장 기본이 되는 구조로서 이에 대한 특성을 살펴보는 것은 매우 중요하다 [1]. 한편, 현재 주로 사용되는 평판형 모스펫의 크기가 점차 감소함에 따라 단채널 효과와 같은 현상에 의해 소자 성능이 저하되는 문제점들이 나타난다 [2]. 이러한 문제를 극복하기 위해서 다양한 연구들이 진행되고 있으며, 탄소나노튜브 (CNT)를 이용한 모스펫 또한 하나의 차세대 나노전자소자 후보로서의 가능성을 보이고 있다 [3], [4]. 더 나아가 p-n접합과 같은 형태의 채널을 갖는 CNT 모스펫에 대한 실험 연구들도 진행이 되고 있는데 [5]-[7], 본 논문에서는 다양한 조건에서 CNT 모스펫의 전류-전압 특성과 포텐셜 프로파일을 관측하여 나노 스케일에서 p형 및 n형 CNT가 형성하는 p-n접합이 채널 내에 존재할 때 게이트 및 드레인 전압 변화에 따른 모스펫의 특성 변화를 분석하였다. 더 나아가 이러한 특성들에서 나타나는 경향을 통해 실제 실험을 통해 제작된 CNT의 도핑 농도를 역으로 예측할 수 있는 가능성을 제시하였다.

## METHODS

게이트 전압의 변화에 따른 CNT의 p-n접합 특성을 살펴보기 위해 그림 1. 과 같이 계산 영역을 설정하였다. CNT 모스펫의 각 영역의 길이는 p-n접합의 경계가 게이트의 중간에 위치하도록 소스

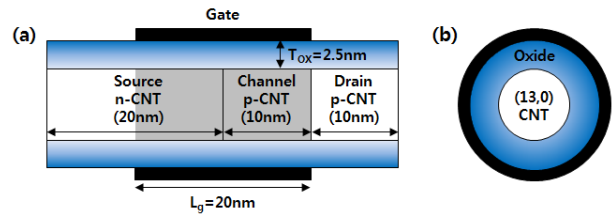


그림 1. 채널의 중앙에서 p-n 접합을 갖도록 하기 위해 CNTFET 시뮬레이션에서 설정한 (a) 전체 계산 영역 및 (b) 단면 그림.

의 길이는 20nm, 채널의 길이는 10nm, 드레인의 길이는 10nm로 각각 고정하였다. 이를 통해 채널이 물질이 이종접합을 갖는 것과 같은 효과를 갖도록 할 수 있다. 한편 게이트의 길이는 20nm로 고정하여 게이트가 소스와 채널영역이 이루는 p-n접합부를 덮고 있도록 설정하였다. 이 때 채널 물질로 사용된 CNT는 약 1 nm의 직경을 갖는 (13,0) 지그재그 CNT이다. 소스 영역은 n형, 채널 및 드레인 영역은 p형 CNT로 모두 동일하게  $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$  로 도핑하여 기본적인 p-n접합의 특성을 살펴보았으며, 도핑 농도가 변화함에 따라 p-n접합의 전류-전압 특성이 어떻게 변화하는지 살펴보기 위해 p형 CNT 부분, 즉 채널 및 드레인 영역의 도핑 농도를 바꾸어서 추가적인 계산을 수행하였다.

## RESULTS

채널 및 드레인 영역 (p형 CNT)의 도핑 농도가  $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$  인 경우에서 게이트 전압 ( $V_g$ ) 을 바꿔가며 계산한 전류-전압 특성 곡선을 그림 2.

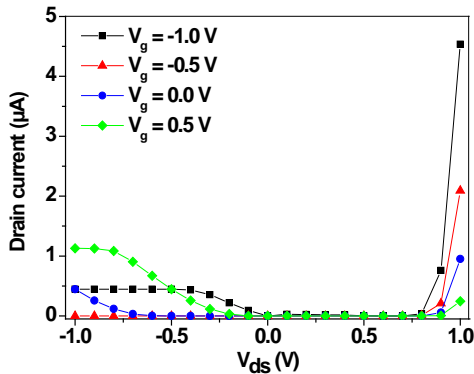


그림 2. CNTFET의 p형 부분(채널 및 드레인)의 도핑 농도가  $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$  일 때, 게이트 전압을  $-1 \text{ V} \sim 0.5 \text{ V}$ 로 변화시켜가며 계산한 전류-전압 특성 곡선.

에 나타내었다. 양의 드레인 전압 ( $V_{ds}$ ) 하에 전류가 흐르는 현상은 일반적인 p-n접합에 순방향 바이어스를 가해주는 것과 동일한 원리와 같이 보이지만, 포텐셜 프로파일과 전류밀도분포를 살펴보면 현상은 동일하나 그 원리는 다를 수 있다.  $V_{ds}=1 \text{ V}$ 일 때 에너지에 따른 전류밀도 분포를 살펴보면 그 분포가 가전자대의 아래 영역에 집중되어 나타나는데, 이는 가전자대 아래 부분의 홀이 드레인에서 소스쪽으로 흘러서 나타나는 전류이다(그림 3. (a), (b)). 또한 순방향 바이어스에서의 전류 크기가  $V_g$ 의 크기에 따라 변하는 것을 관찰할 수 있다.  $V_g=-1 \text{ V}$ 일 때와  $0.5 \text{ V}$ 일 때의 포텐셜 프로파일(그림 3. (a))에서 볼 수 있듯이 p-n접합으로 인해 나타나는 장벽이 게이트 전압에 의해 홀이 흐르는 에너지 대역에 더 가까이 밀려 내려간다. 즉, 홀이 흐르는 경로에 에너지 장벽이 더 근접하여 흐름을 방해하여 전류의 크기가 작아진다고 생각할 수 있다.

나노 스케일의 CNT p-n접합에서는 게이트 전압에 따른 차이는 있으나 일반적인 p-n접합이 보이는 정류현상이 나타나지 않는다. 이와 같이 역방향 바이어스에서도 전류가 나타나는 이유는 밴드 대 밴드 터널링(BTBT)에 의한 것이다. 이는  $V_g=0 \text{ V}$ 인 조건, 즉 온전히 드레인 전압에 의한 효과를 확인하기 위한 그림 3. (c), (d)의 순방향 및 역방향 바이어스에서의 포텐셜 프로파일과 전류밀도분포를 비교하여 살펴 보면 알 수 있다.  $V_{ds}=1 \text{ V}$ 인 경우에는 앞에서 설명한 홀의 흐름에 의한 전류인 반면,  $V_{ds}=-1 \text{ V}$ 인 경우에는 전류가

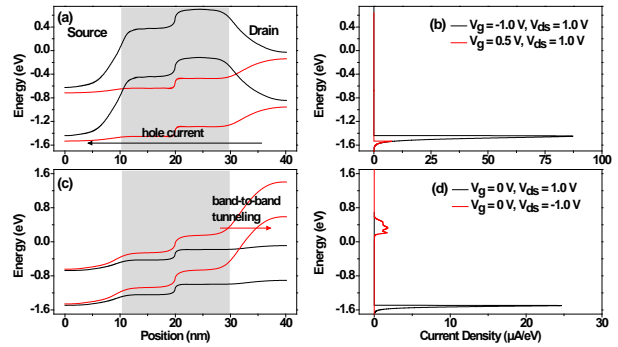


그림 3. 도핑농도가  $1 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$ 일 때  $V_{ds}=1 \text{ V}$ ,  $V_g=-1 \text{ V}$ 와  $V_g=0.5 \text{ V}$ 인 경우의 (a) 포텐셜 프로파일 및 (b) 전류밀도분포 비교(게이트 부분은 음영으로 표시),  $V_g=0 \text{ V}$ 에서의 순방향 및 역방향 바이어스에 따른 (c) 포텐셜 프로파일 및 (d) 전류밀도분포 비교.

발생하는 에너지 대역이 약  $0.2 \sim 0.6 \text{ eV}$  임을 볼 수 있는데, 이는 포텐셜 프로파일에서 전도대의 전자가 직접 가전자대로 이동하는 BTBT에 의한 전류이다.

일반적인 p-n접합의 전도대 및 가전자대의 형성은 페르미 준위가 어디에 존재하는지에 따라 결정이 되므로 도핑 농도가 변함에 따라 포텐셜 프로파일이 함께 변하게 된다. 따라서 도핑 농도가 변하면 p-n접합의 특성도 함께 변하는 의존성을 갖는다. 이를 확인하기 위해 p형 CNT의 도핑 농도를  $7 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$ 로 바꾸어 계산한 전류-전압 특성 곡선을 그림 4.에 나타내었다. 도핑 농도가 변할 시 역방향 바이어스의 경우의 전류가 더 큰 영향을 받음을 볼 수 있다. 앞의 계산에서 역방향 전류가 나타나지 않는  $V_g=-0.5 \text{ V}$ , 도핑농도가

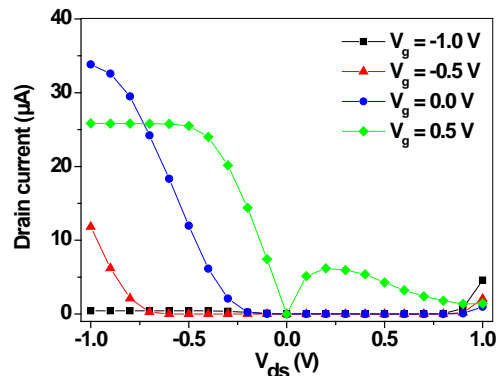


그림 4. CNTFET p형 도핑 농도가  $7 \times 10^7 \text{ cm}^{-1}$ 일 때의 전류-전압 특성 곡선.

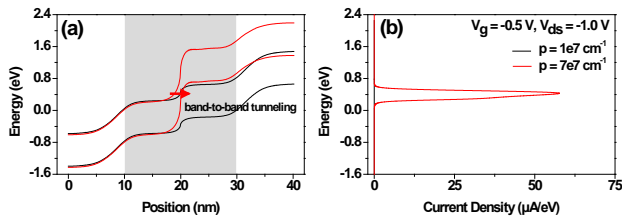


그림 5.  $V_g = -0.5$  V,  $V_{ds} = -1$  V에서 도핑 농도 변화에 따른 (a) 포텐셜 프로파일 비교 및 (b) 전류밀도분포 비교.

$1 \times 10^7$   $\text{cm}^{-1}$ 인 경우와 동일한 게이트 전압 조건에서 비교하면 p형 CNT의 전도대 및 가전자대가 더 위로 올라갔음을 확인할 수 있다. 이는 p형 CNT의 도핑농도가 커짐에 따라 페르미 준위가 낮아지기 때문에 나타나는 현상이다. 페르미 준위가 낮아진 상태에서 p-n접합을 형성하면서 p형 및 n형 부분의 페르미 준위가 정렬이 되고 이때 접합 부분에서의 프로파일이 더 급격하게 변하게 된다. 이러한 현상은 그림 5. (a)에서 음영으로 표시된 p-n접합부에서의 포텐셜 프로파일을 비교해보면 명확히 알 수 있다. 이에 따라 접합부에서의 급격한 포텐셜 프로파일 변화로 인해 앞서 설명한 역방향 바이어스에서 전류가 흐르는 원리인 BTBT가 마찬가지로 나타나게 된다. 한 가지 차이점은 앞의 결과에서는 음영으로 표시된 게이트가 덮고 있는 부분의 바깥 부분에서 BTBT가 나타나는 반면, 도핑 농도를 바꾼 후의 결과에서는 접합부에서 BTBT가 나타난다는 점이다. 이는 도핑 농도를 바꾸기 이전의 경우에는 접합부에서 BTBT가 발생할 만큼의 충분한 프로파일 차이를 갖지 못하기 때문이다. 그럼에도 불구하고 BTBT가 발생하는 이유는 아무런 전압도 걸리지 않은 평형 상태에 비해서  $V_{ds}$ 가 음의 값을 가지고 동시에  $V_g$ 는 가해지지 않는 조건 하에서 드레인 쪽의 가전자대 및 전도대 프로파일이 BTBT현상이 나타날 수 있게끔 형성되기 때문이다.

그림 5. (b)에서와 같이 도핑 농도가 변하였을 때의 전류밀도분포를 비교하면 도핑 농도에 따른 효과를 더 명확히 확인할 수 있다.  $V_g = -0.5$  V에서 도핑 농도가 바뀌기 전과 후의 전류밀도분포를 살펴보면, 도핑농도가 바뀌기 전의 경우에는 역방향 바이어스에서 전류밀도분포가 존재하는 에너지 대역이 나타나지

않음을 알 수 있다. 이는 앞서 이야기한 역방향 바이어스에서 전류가 흐르는 원리인 BTBT가 나타나지 않기 때문이라고 볼 수 있다. 반면 도핑 농도가 바뀐 후에는 역방향 바이어스에서 전류가 흐르는 것을 확인할 수 있다. 이와 같은 차이가 나타나는 이유는 도핑 농도가 바뀌기 이전과 이후 각각의 경우에 대한 포텐셜 프로파일을 비교했을 때, 도핑 농도가 변함에 따라 p-n접합부에서의 포텐셜 프로파일이 급격히 변하게 되어 이전에는 나타나지 않던 BTBT현상이 도핑 농도가 바뀐 이후 나타나기 때문이다. 그림 5. 의 결과에서 확인할 수 있듯이, 도핑 농도를 바꾸기 이전에는 전류밀도분포가 나타나지 않음을 알 수 있으며 도핑 농도를 바꾼 이후에는 p-n접합부에서의 급격한 포텐셜 프로파일 변화로 인해 BTBT가 나타나는 에너지 대역, 즉 p-n접합이 있는 영역의 에너지 대역에서 전류밀도분포가 관찰됨을 볼 수 있다.

## DISCUSSION

지금까지 우리는 CNT 모스펫에 대한 시뮬레이션 결과를 통해 나노 크기 단위에서의 CNT p-n접합이 보이는 특성을 살펴보았다. 하지만 이의 결과를 CNT에 한정하지 않고 나노 크기 단위의 작은 일반적인 p-n접합으로 확장하여 생각해 볼 수도 있을 것이다. 물질이 바뀌더라도 도핑 농도에 따른 포텐셜 프로파일의 형성, 외부 바이어스 조건에 따른 포텐셜 프로파일의 변화 및 이에 따른 전류의 흐름과 같은 현상이 나타나는 원리는 크게 다르지 않을 것이기 때문에, 본 연구를 통해 살펴본 결과들을 확장하여 생각하는데 큰 무리가 없을 것이라 예상된다.

또 다른 생각해볼 점은 역방향 바이어스에서의 전류가 도핑농도에 따른 의존성을 보인다는 사실이다. p형 및 n형의 도핑 농도가 변함에 따라 페르미 준위가 변하여 접합부에서의 BTBT가 더 크게 나타날 수도, 더 적게 나타날 수도 있다. 즉, 동일한  $V_g$ 를 가해주고 역방향 바이어스에서의 전류를 살펴봄으로써 CNT의 도핑 정도를 예측해볼 수도 있을 것이다. 그림 6.은 이와 같이  $V_g$ 를 고정한 채 p형 부분의 도핑 농도를 바꾸어가며 나타나는 전류-전압 특성 곡선이다. 도핑 농도가 커짐에 따라 역방향 바이어스에서의 전류의 크기가 점차 증가함을 확인할 수 있다. 이

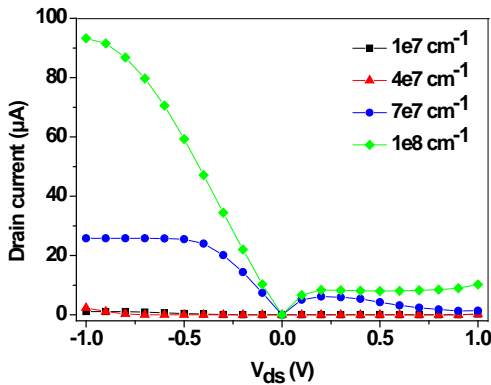


그림 6.  $V_g=0.5$  V에서 p-형 CNT의 도핑 농도 변화에 따른 전류-전압 특성 곡선.

와 같은 도핑 농도에 따른 역방향 바이어스에서의 전류 경향을 살펴봄으로써 앞서 이야기한대로 나노 크기 단위의 CNT를 제작할 때 도핑 여부와 대략적인 도핑 농도를 예측해보는 방향으로도 본 연구를 확장하는 방안도 생각해볼 수 있다. 다만 보완되어야 할 부분은 역방향 바이어스에서의 전류가 흐르는 BTBT가 p-n접합부에서 나타나지 않는 경우가 있다는 점이다. 예를 들면 그림 3. (c)와 같은 경우이다. 이와 같이 접합부에서의 BTBT가 아닌 다른 영역에서의 BTBT로 인한 전류는 단순히 도핑 농도에 의해서만 결정되는 것이 아니라 게이트 및 드레인 바이어스에 따라서도 나타날 수 있다. 이러한 경우로 인해 전류가 발생하게 되면 도핑 농도의 변화로 인한 전류뿐만 아니라 가해진 바이어스에 따른 전류도 함께 고려해야 하기 때문에 정확한 경향성을 예측하기가 어렵게 된다. 이를 보완하기 위해서는 역방향 바이어스의 최대값을 조절해가며 p-n접합부 이외의 영역에서 나타나는 BTBT에 의한 전류를 최소화할 필요가 있다. 그렇게 함으로써 바이어스에 따른 변수를 제외하고 온전히 도핑 농도에 의해서만 나타나는 역방향 바이어스에서의 전류의 경향만을 살펴보아야 하며, 이를 통해 CNT의 도핑 농도를 보다 정확하게 예측해볼 수 있을 것이다.

## CONCLUSION

이상에서 CNT 모스펫의 전류-전압 특성 및 포텐셜 프로파일을 통해 CNT p-n접합이 갖는 특성을 살펴보았다. 순방향 바이어스에서의

전류는 홀의 흐름을 통해 기술이 되며, 이는 게이트 전압이 증가함에 따라 에너지의 장벽이 그 흐름을 방해하는 경향을 보인다. 반면 역방향 바이어스에서의 전류는 BTBT가 일어나는 정도가 좌우하게 된다. 이 때 BTBT가 일어나는 원리는 도핑 농도의 차이에 의해 p-n접합의 접합부에서 나타나는 급격한 포텐셜 프로파일의 변화에 의한 것과, 게이트 및 드레인 바이어스에 의해 접합부 이외의 지점에서 나타나는 두 가지 경우로 나누어 볼 수 있다. 접합부에서의 BTBT로 인한 전류는 도핑 농도에 큰 의존성을 나타내며, 이를 통해 CNT의 도핑 농도를 대략적으로 예측할 수 있는 가능성을 확인하였다. 반면 바이어스의 영향으로 인해 나타나는 BTBT의 경우는 도핑 농도에 대한 의존성 외의 변수를 고려해야 하기 때문에 도핑 농도를 예측하는데 있어서 방해가 되는 요소로 작용한다. 따라서 이와 같은 효과를 최소화하는 시뮬레이션 조건을 추가적으로 찾아보아야 할 것이다.

## ACKNOWLEDGEMENT

본 연구는 EDISON 중앙센터와 나노물리 전문센터의 지원을 받아 수행되었습니다.

## REFERENCES

- [1] C. T. Sah *et al*, Proc. IRE, 45, pp. 1228-1243 (1957).
- [2] B.Doris *et al.*, IEDM Tech. Dig., 267 (2002).
- [3] J. Appenzeller *et al.*, Phys. Rev. Lett. 89, 126801 (2002).
- [4] P. Avouris *et al*, Proc. IEEE, 91, pp. 1772-84 (2003).
- [5] A. Javey *et al*, Nature, 424, 654 (2003).
- [6] T. Durkop *et al*, Nano Lett., 4, 35 (2004).
- [7] J. Park *et al.*, Nanotechnology, 22, 285302 (2011).