

УДК 519.2:541.1

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИМПЛАНТАЦИИ В КРЕМНИЙ ЛЕГИРУЮЩИХ ДОНОРНЫХ И АКЦЕПТОРНЫХ ПРИМЕСЕЙ

Г. А. Тарнавский¹

Проводится краткое описание вычислительного метода математического моделирования одного из основных технологических процессов производства наноструктурированных полупроводниковых материалов. Приводятся результаты расчетов при вариации определяющих параметров. Обсуждаются некоторые проблемы математического моделирования при уменьшении размеров нанoeлектромеханических систем. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 08-07-12001-офи).

Ключевые слова: математическое моделирование, легирование кремния, имплантация, донорные и акцепторные примеси.

1. Введение. Современные технологии проектирования, конструирования и производства нанoeлектромеханических систем (НЭМС-технологии) базируются на сложных физико-химических и механических процессах. Эти процессы составляют цепочку базовых стадий (сегментов) промышленного производства разнообразных НЭМС-устройств.

Одним из важных технологических процессов является легирование. Легирование (допирование) — процесс внедрения в кремниевую пластину примесей акцепторного и/или донорного типа (фосфора, мышьяка, сурьмы, бора, галлия и т.п.) в целях создания в полупроводнике зон повышенной проводимости *n*- и *p*-типа для организации диодных и транзисторных каналов.

Кроме того, легирование может быть направлено на достижение иных технологических целей. Например, легирование бором останавливает процесс травления основного материала.

Среди технологий легирования наиболее эффективной и применяемой в настоящее время является ионная имплантация, которая заключается во внедрении в полупроводниковый материал ионизированных атомов, разогнанных в электрическом поле и обладающих высокой энергией. Эта технология требует специализированных сложных установок, но является намного более точной, чем диффузионный метод, и применяется для создания скрытых слоев, *p*- и *n*-карманов, доменов в чипе, формирующих транзисторные каналы.

Компьютерные эксперименты, являясь, по сравнению с физическими, более мобильными и гораздо более дешевыми (если не считать затрат интеллектуальных усилий), с возможностью перебора сотен и даже тысяч вариантов, с быстрым и эффективным анализом их результатов, а также со способностью наращивания уровней используемых физико-математических моделей, играют все более и более возрастающую роль в дизайне новых полупроводниковых материалов.

В настоящей работе на основе компьютерного моделирования с использованием программного комплекса NanoMod проводится исследование влияния параметров технологического процесса (прицельного угла и энергии имплантации) на распределения концентраций легирующих примесей в кремниевой подложке.

2. Компьютерный инструментарий. Программный комплекс NanoMod [1] предназначен для проведения научных исследований и прикладных разработок в области микроэлектроники, в том числе микропроцессорной техники. Комплекс может быть использован для обучения специалистов, аспирантов и студентов в данной области знания.

Вычислительный инструментарий NanoMod создается на базе современных оригинальных алгоритмов моделирования электрофизических, термохимических и механических процессов (см. [2] и библиографию в ней) для компьютерной поддержки автоматизированного проектирования наноструктурированных полупроводниковых материалов.

¹ Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, пр. Лаврентьева, 6, 630090, Новосибирск; вед. науч. сотр., e-mail: gennady.tarnavsky@gmail.com

В работе представляются результаты, полученные при использовании одного из сегментов программного комплекса — решателя IMPL (implantation).

3. Решатель IMPL. Алгоритм сегмента IMPL инструментария NanoMod основан на методе численного расчета закона Гаусса для распределения в кремниевой подложке концентраций допинг-примесей различных элементов, внедренных способом ионной имплантации [3]:

$$C_1(\xi) = A \exp(B(\xi - \xi_0)^2). \quad (1)$$

В (1) координатное направление ξ есть направление движения ионов от разгонного устройства к подложке. В общем случае это направление не является перпендикулярным к поверхности подложки, а составляет с нормалью к ней угол α_1 . Значение координаты ξ отсчитывается от точки начала внедрения иона в подложку с увеличением значения ξ при движении вглубь материала. Величины A , B и ξ_0 являются константами, зависящими от физических факторов — типа S_1 и дозы D_1 имплантанта, энергии ускорения ионов E_1 :

$$A = A(S_1, D_1, E_1), \quad B = B(S_1, D_1, E_1), \quad \xi_0 = \xi_0(S_1, D_1, E_1). \quad (2)$$

Величина ξ_0 в (2) является глубиной максимума внедрения ионов в подложку — пиком распределения Гаусса (1) с экспоненциально уменьшающейся вглубь материала и к его поверхности концентрации примесей.

При наличии на поверхности подложки защитных масок, непрозрачных для потока имплантируемых ионов, может быть учтено распространение примесей в тангенциальном направлении под маской, вдоль второго координатного направления η , перпендикулярного ξ [4]:

$$C_2(\eta) = F \operatorname{erf}(k(\eta - \eta_0)), \quad (3)$$

$$F = F(S_1, D_1, E_1), \quad k = k(S_1, D_1, E_1), \quad \eta_0 = \eta_0(S_1, D_1, E_1). \quad (4)$$

Величины F , k и η_0 в (3) и (4) имеют следующий смысл. Параметр η_0 есть координата края маски, от которого отсчитывается значение координаты η (под маску), а параметры F и k являются константами, зависящими от физических параметров задачи.

Результирующая концентрация выражается в виде

$$C(\xi, \eta) = C_1(\xi)C_2(\eta). \quad (5)$$

В координатах (x, y) реальных задач при непланарности поверхности подложки и/или ненулевом значении прицельного угла имплантации функция $C(x, y)$ в (5) не может быть представлена в виде расщепления на произведение $C_1(x)$ и $C_2(y)$. Вследствие этого в решателе используется численный алгоритм расчета задачи (1)–(5) в (ξ, η) -координатах. Затем это решение представляется в (x, y) -координатах.

Значения величин S_1 , D_1 , E_1 , α_1 вводятся пользователем в соответствии с формулировкой задачи. Значения параметров A , B , F , k , ξ_0 и η_0 содержатся в специализированной БД комплекса и вводятся системой поддержки заданий без участия пользователя.

Следует отметить, что полнота таблиц этих параметров и их постоянно уточняемые в физических экспериментах (выполняемых на современной исследовательской технике) числовые значения, которые своевременно вводятся в базу данных решателя, повышают эффективность вычислительного инструментария.

Алгоритмы решателя учитывают несколько сценариев процесса. Первый из них — имплантант внедряется в кремний и остается в нем. Второй — имплантант внедряется в кремний, проходит через него и вылетает в свободное пространство. Третий сценарий аналогичен второму, но с последующим внедрением в другую часть подложки кремния. Последующие сценарии предусматривают ситуации (редко реализуемые в практических задачах) с пробитием имплантантом нескольких выступов нанорельефа поверхности. Следует отметить, что вторая ситуация часто имеет место при существенно непланарной поверхности с наличием высоких и тонких выступов нанорельефа и при больших значениях прицельного угла имплантации с целью легирования вертикальных участков поверхности.

Алгоритмы решения задач по первому сценарию достаточно стандартны и базируются на хорошо известных методах вычисления интегралов. Сценарии с вылетом имплантанта из участка кремния и последующим влетом в другой участок, с энергетическими потерями на пробитие поверхности (рассеивание и дифракция луча на поверхности пока не учитываются) реализуются алгоритмами “noy-hay” и здесь не приводятся и не анализируются.

4. Компьютерное моделирование. Формулировка задачи. В области

$$x \in [0, x_{\max}], \quad y \in [0, y_{\max}], \tag{6}$$

состоящей из двух подобластей — подобласти внешней среды R_V и подобласти кремния R_{Si} , которые разделяются границей

$$y = Y_{Si}(x), \tag{7}$$

отыскивается решение задачи (1)–(5). Целью решения является определение распределения в расчетной области концентраций примесей $C(x, y)$ и их зависимости от определяющих параметров (нанорельефа поверхности, типа имплантанта, энергии и прицельного угла имплантации). При этом полагается, что легирование производится только в R_{Si} , т.е. при $y < Y_{Si}$, а в R_V имеют место нулевые концентрации имплантируемых примесей.

Для численного решения задачи (1)–(5) в (6) строится дискретная расчетная сетка с числом узлов N_x и N_y по x - и y -направлениям соответственно.

В представляемом ниже спектре задач моделирование проводилось в области $x_{\max} = 100$ нм и $y_{\max} = 60$ нм на сетке с $N_x = 151$ и $N_y = 151$ при следующих значениях параметров задачи в (2) и (4): исследовалась имплантация фосфора P, бора B и мышьяка As (параметр S_I), доза имплантанта была фиксированной ($D_I = 10^{15}$ см³), а энергия имплантации E_I варьировалась в пределах от 1 эВ до 20 эВ.

Значения концентраций, полученных в расчетах, приводятся в размерных единицах (см³).

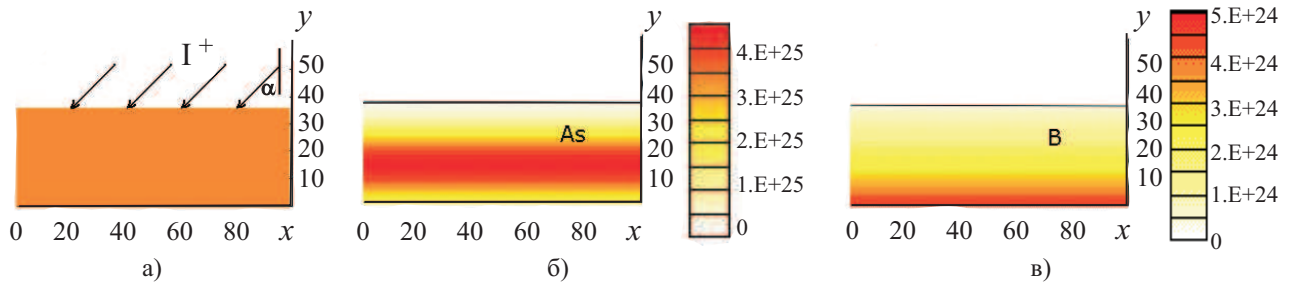


Рис. 1. Имплантация легирующих донорных и акцепторных примесей в подложку кремния Si с планарной поверхностью: а) схема процесса, б) распределения концентраций мышьяка As, в) распределения концентраций бора B. Энергия имплантации 15 эВ

5. Имплантация в кремний с планарной поверхностью. Рассмотрим результаты решения задачи при постоянном значении $Y_{Si} = 35$ в (7), энергии имплантации 5 эВ и трех типов допинга: As, B и P.

Рис. 1 иллюстрирует результаты вычислений сегмента. Показана схема имплантации и распределение концентраций мышьяка As и бора B в кремнии Si. Заметим, что при одной и той же энергии имплантации глубина внедрения B в Si больше, чем As в Si. Максимум распределения As имеет место при $y = 20$ (на глубине 15 нм от поверхности), а B — при $y = 0$ (глубина 35 нм).

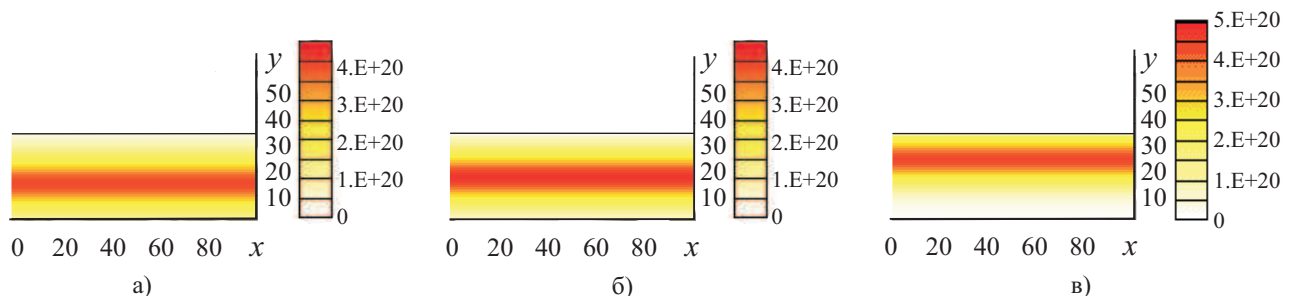


Рис. 2. Имплантация фосфора P в подложку кремния Si с планарной поверхностью. Энергия имплантации 15 эВ. Распределения концентраций P в Si при значении прицельного угла имплантации 0° (а), 30° (б) и 60° (в)

Максимум концентрации P (рис. 2а) находится на глубине 20 нм ($y = 15$). Таким образом, при одной и той же энергии имплантации фосфор внедряется в кремний глубже, чем мышьяк, но уступает по этому показателю бору.

Ширина имплантированного слоя больше всего у As, а меньше — у В. Процесс диффузии примесей с течением времени размывает это распределение со скоростью, зависящей от ряда факторов (температуры, типа кристаллической решетки и др.).

Проанализируем влияние прицельного угла имплантации α_1 . На рис. 2 показаны результаты расчета имплантации фосфора при значениях $\alpha_1 = 0^\circ, 30^\circ$ и 60° (рис. 2а, 2б и 2в соответственно). Угол α_1 отсчитывается от координатных линий $x = \text{const}$, в данной задаче — от направления нормали к поверхности базовой подложки.

Априори можно прогнозировать, что в результате моделирования 2D-задачи должны быть получены 1D-структуры распределения концентраций $C = f(y)$, и такая постановка задачи является, помимо получения научных данных, тестом на корректность функционирования вычислительного алгоритма и реализующей его компьютерной программы.

Результаты расчетов соответствуют прогнозам: распределения концентраций фосфора зависят только от y -координаты.

При этом имеет место следующий факт — с увеличением α_1 глубина внедрения P в Si уменьшается и, естественно, прямо пропорционально $\cos \alpha_1$, что имеет место на рис. 2.

Функции распределения $C(\alpha_1, y)$, где α_1 рассматривается как параметр, коррелируют друг с другом при вариации α_1 с небольшими отличиями. Так, функция $C(60^\circ, y)$ более узко локализована, чем $C(0^\circ, y)$, и ее максимум примерно на 15% больше. Вид и цифровые значения функции $C(30^\circ, y)$ занимают промежуточное положение между $C(0^\circ, y)$ и $C(60^\circ, y)$.

Отличия функций связаны с близостью границы Si к y -координате максимума распределения Гаусса (1), и “хвост” этого распределения “отсекается” поверхностью подложки.

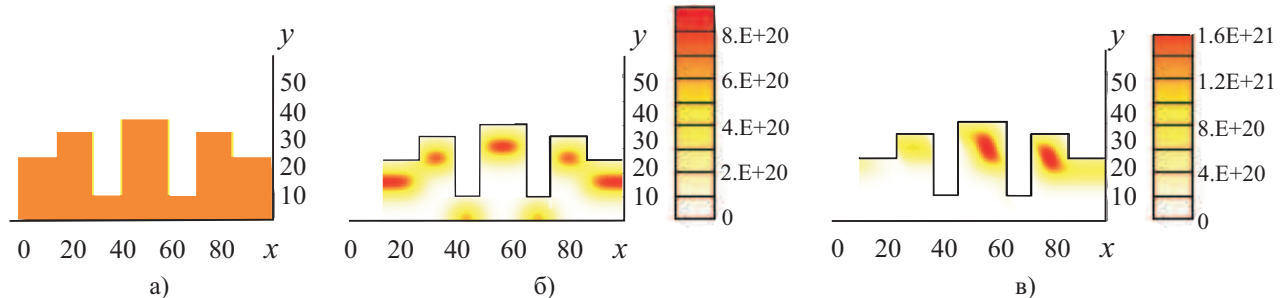


Рис. 3. Имплантация фосфора P в подложку кремния Si с непланарной поверхностью: конфигурация подложки (а), распределения концентраций P в Si при значении прицельного угла имплантации 0° (б) и 60° (в). Энергия имплантации 5 эВ

6. Имплантация фосфора в подложку с непланарной поверхностью. Рассмотрим результаты компьютерного моделирования имплантации фосфора P в кремний Si с непланарной поверхностью при вариации прицельного угла α_1 и энергии имплантации E_1 .

На рис. 3а показана конфигурация (размеры в нм) базовой подложки Si с отфрезерованными в ней канавками. Этап технологического цикла операций с подобными конфигурациями часто имеет место при формировании полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами НЭМС-узлов, в частности элементов трехзатворных нанотранзисторов SON-конструкций (“silicon-on-nothing” [5, 6]).

На рис. 3б и 3в показаны распределения $C(x, y)$ при значениях $\alpha_1 = 0^\circ$ и 60° соответственно.

При $\alpha_1 = 0^\circ$ допинг-примеси образуют узко локализованные домены с размерами порядка 5–10 нм и максимумами глубины внедрения около 7–8 нм (при данной энергии имплантации $E_1 = 5$ эВ). Заметим, что в зонах глубоких траншей имплантант достигает нижнего края (дна) подложки.

При имплантации под большим углом $\alpha_1 = 60^\circ$ (рис. 3в) допинг-домены, естественно, “разворачиваются” к направлению потока имплантанта.

При таком нанорельефе поверхности в подложке возникают теневые зоны. Так, в левом выступе Si концентрация P незначительна, а на бортах траншей и дне пластины концентрация $C(x, y)$ практически равна нулю.

Влияние энергии имплантации E_1 при фиксированном прицельном угле $\alpha_1 = 30^\circ$ и том же наноре-

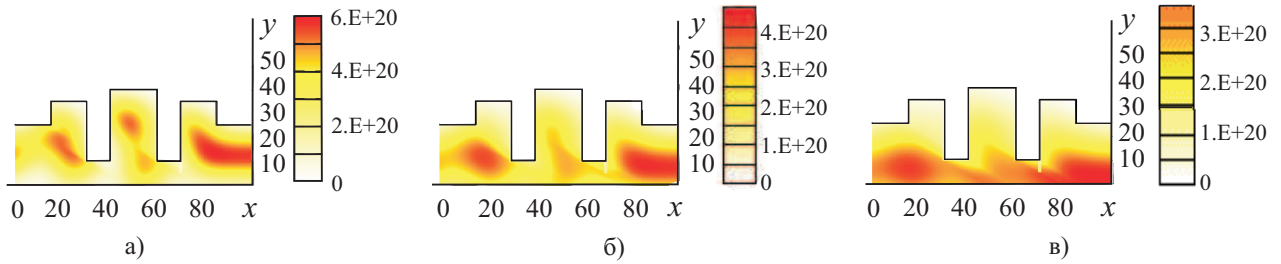


Рис. 4. Имплантация фосфора P в подложку кремния Si с непланарной поверхностью. Распределения концентраций P в Si при значении прицельного угла имплантации 30° и энергии имплантации 5 эВ (а), 10 эВ (б) и 15 эВ (в)

льфе поверхности иллюстрирует рис. 4. Возрастание E_I от 5 эВ (рис. 4а) до 10 эВ (рис. 4б) и далее, до 15 эВ (рис. 4в) существенно меняет картину распределения P в Si.

Меняется дислокация, размеры и интенсивность допинг-пятен. Так, в частности, при $E_I = 5$ эВ в центральном выступе образуется допинг-домен, хотя и небольшой интенсивности и размера, но достаточно заметное. При $E_I = 10$ эВ этот домен существенно размывается, а при $E_I = 15$ эВ центральный выступ вообще является “прозрачным” для потока имплантанта, который “проходит его насквозь” и дислоцируется в левом сегменте конфигурации подложки.

Концентрация P в левом сегменте существенно зависит от E_I и меняется от небольшого домена (рис. 4а) до образования обширной зоны (рис. 4в).

Правый сегмент конфигурации подложки, как незатемняемый, более консервативен по отношению к вариации E_I : допинг-домен здесь имеет примерно одинаковые размеры, но, естественно, при увеличении E_I смещается вглубь подложки вплоть до самого ее дна (рис. 4в).

В заключение отметим, что функция $C(x, y)$ определяет организацию в Si зон повышенной электропроводности, в которых возможна организация (см., например, [6, 7]) каналов нанотранзисторов.

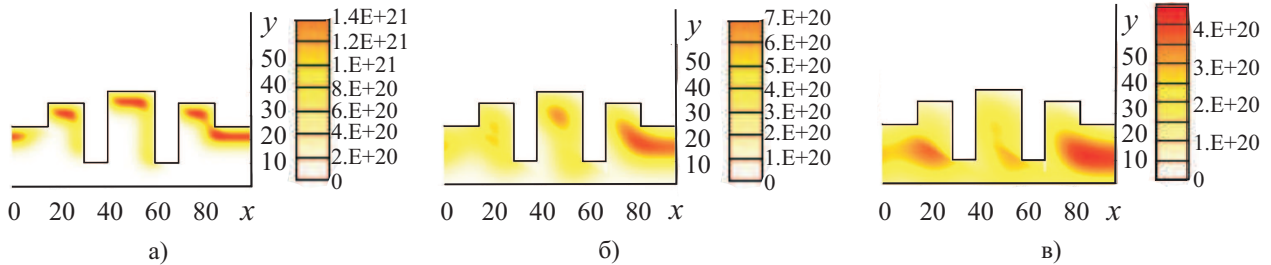


Рис. 5. Имплантация бора B в подложку кремния Si с непланарной поверхностью. Распределения концентраций B в Si при значении прицельного угла имплантации 30° и энергии имплантации 1 эВ (а), 3 эВ (б) и 5 эВ (в)

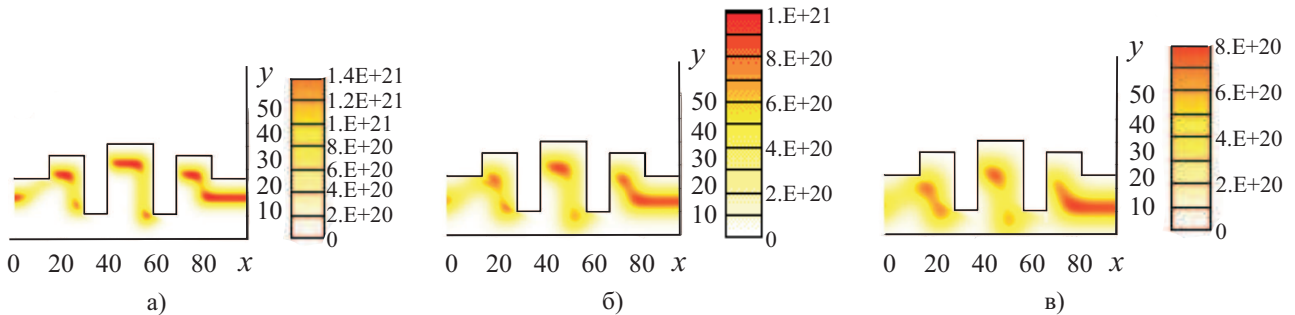


Рис. 6. Имплантация мышьяка As в подложку кремния Si с непланарной поверхностью. Распределения концентраций As в Si при значении прицельного угла имплантации 30° и энергии имплантации 5 эВ (а), 10 эВ (б) и 15 эВ (в)

7. Имплантация бора и мышьяка в подложку с непланарной поверхностью. Имплантация химических элементов в существенной мере определяется атомным весом имплантируемого элемента.

Так, при одной и той же энергии имплантации глубина внедрения бора В (атомный вес 10.8) больше, чем у фосфора Р (атомный вес 31) и, тем более, мышьяка As (атомный вес 74.9).

На рис. 5 и 6 приведены распределения концентраций соответственно В и As при их допинге в подложку Si с непланарной поверхностью при значении прицельного угла 30° , дозе имплантанта 10^{15} см^{-3} и вариации энергии имплантации E_1 от 1 эВ до 15 эВ. Рассмотрим распределение концентраций в сегментах нанорельефа поверхности.

Максимум концентрации В находится в правом сегменте на глубине около 5 нм при $E_1 = 1$ эВ (рис. 5а), смещается на глубину 10 нм при $E_1 = 3$ эВ (рис. 5б) и достигает глубины около 14 нм при $E_1 = 5$ эВ (рис. 5в). Отметим, что ширина допинг-доменов существенно увеличивается с ростом E_1 .

Максимум концентрации As дислоцируется на глубине около 6 нм, 12 нм и 15 нм при имплантации со значительно большей энергией 5 эВ, 10 эВ и 15 эВ (рис. 6а, 6б, 6в соответственно). При этом ширина допинг-доменов As заметно меньше, чем у допинг-доменов В.

Необходимо отметить, что ширина допинг-доменов есть термин достаточно приближенный, опирающийся в данном случае на визуальное восприятие полученных численных результатов, что по цифровым шкалам соответствует областям, в которых концентрация примесей составляет более половины от максимальной. Следует также отметить, что для расчетов со значением $\alpha_1 = 30^\circ$ визуально очень хорошо просматриваются теневые зоны подложки (левые края выступов), где концентрации примесей минимальны.

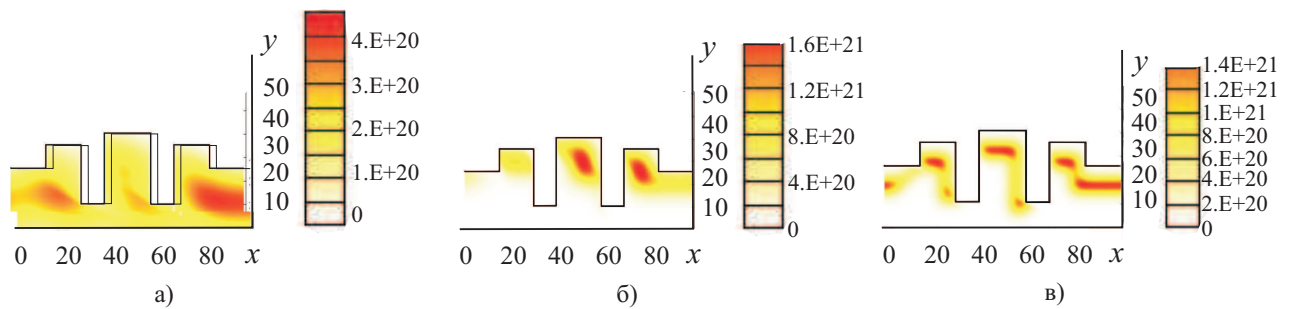


Рис. 7. Имплантация бора В, фосфора Р и мышьяка As в подложку кремния Si с непланарной поверхностью. Распределения концентраций В (а), Р (б) и As (в) в Si при значении прицельного угла имплантации 30° и энергии имплантации 5 эВ

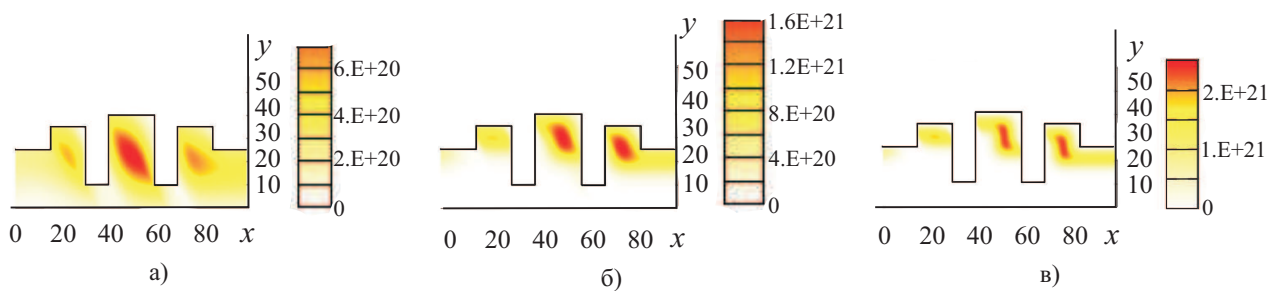


Рис. 8. Имплантация бора В, фосфора Р и мышьяка As в подложку кремния Si с непланарной поверхностью. Распределения концентраций В (а), Р (б) и As (в) в Si при значении прицельного угла имплантации 60° и энергии имплантации 5 эВ

8. Допинг донорных и акцепторных примесей: сравнительный анализ. Проведем анализ результатов имплантации примесей акцепторного (бор В) и донорных (фосфор Р, мышьяк As) типов в подложку кремния Si с непланарной поверхностью при равных значениях всех определяющих параметров. На рис. 7 и 8 показаны распределения концентрации В (рис. 7а, 8а), Р (рис. 7б, 8б) и As (рис. 7в, 8в) при следующих значениях параметров технологического процесса — дозе имплантации $D_1 = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, энергии имплантации $E_1 = 5$ эВ и прицельном угле имплантации $\alpha_1 = 30^\circ$ (рис. 7) и $\alpha_1 = 60^\circ$ (рис. 8).

Отметим, что, естественно, при высоком значении α_1 в нанорельефе поверхности имеются весьма протяженные теневые зоны, существенно большие, чем при умеренных значениях α_1 . В тень имплантации попадают дно и правые борта канавок на всем их протяжении, а также нижние части левых бортов канавок. Наличие теневых зон существенно меняет картину распределения примесей В, Р и As в Si. Эти распределения весьма отличаются друг от друга даже при одном и том же значении α_1 для различных

типов примесей.

Так, допинг-домены В (рис. 7а), особенно в правом сегменте нанорельефа, являются наиболее обширными и “размытыми” с максимумом около $4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, лежащим на глубине примерно 15 нм от поверхности в точке расчетной области с координатами (90, 10) и (20, 10).

Допинг-домены As (рис. 7в) существенно более локализованы и имеют форму не “размытых” пятен, как у В, а достаточно узких полос, в которых максимум достигает значений $1.4 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ на отрезках (20–26, 30) в левом сегменте, (45–55, 38) в центральном сегменте, (85–100, 20) в правом сегменте нанорельефа.

Допинг-домены Р (рис. 7б) занимают промежуточное положение между доменами В и As: по форме они ближе к В-доменам, но узколокализованы, как As-домены. Максимумы концентрации Р располагаются в двух зонах с центрами (55, 35) и (78, 30) и примерно равны $1.6 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$.

Результаты процесса легирования под высоким прицельным углом $\alpha_1 = 60^\circ$ (рис. 8) заметно отличаются от результатов имплантации при $\alpha_1 = 30^\circ$. Как анализировалось выше (рис. 2), при увеличении α_1 , при остальных равных параметрах, глубина внедрения имплантанта уменьшается. Это также имеет место и для имплантации примесей в кремний с непланарной поверхностью.

В особенности это заметно при имплантации бора (при сравнении рис. 7а и 8а). Допинг-домен В с максимумом концентрации изменил дислокацию с правого сегмента нанорельефа на его центральный выступ. При этом средняя линия данного домена наклонена к оси x под углом 60° , то есть, естественно, перпендикулярна направлению потока имплантанта. Второй (по максимуму) домен В расположен в правом столбце нанорельефа.

Допинг-домены Р и As также дислоцируются в центральном и правом столбцах подложки Si. Их размеры меньше размеров доменов В, но значения максимумов концентраций выше: у В — $0.6 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$, у Р — $1.6 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$, у As — $2 \times 10^{21} \text{ см}^{-3}$ (рис. 8а, 8б, 8в соответственно).

Полученные выше результаты коррелируют с физикой явления, однако конкретные численные значения могут быть получены только в результате компьютерного моделирования.

Таким образом, компьютерные эксперименты позволяют, при наличии эффективно функционирующего программного комплекса, провести исследования и определить оптимальные параметры технологического процесса легирования для создания допинг-доменов донорных и/или акцепторных примесей в определенных зонах подложки кремния с непланарной поверхностью.

9. Миниатюризация НЭМС: проблемы математического моделирования. Совершенствование промышленного производства электроники и переход за последние 5 лет от 130 нм-технологий к 90 нм-, 65 нм-, 45 нм-, 32 нм- и к 22 нм-технологиям ставят новые и весьма сложные проблемы математического моделирования электрофизических, термохимических и механических процессов, используемых в этих технологиях, в рамках модели сплошной среды.

Так, размер расчетной области задачи R , как правило, составляет уже около 100 нм (в разных координатных направлениях по-разному, в зависимости от формулировки задачи).

Выпишем некоторые физические характеристики кремния Si (при температуре около 300 град. К и давлении 1 атм): длина волны де Бройля $L_1 = 12 \text{ нм}$; шаг кристаллической решетки $L_2 = 0.54 \text{ нм}$; размер атома по Мелвину–Хьюзу $L_3 = 0.12 \text{ нм}$.

Сопоставляя значения R со значениями L_1 , L_2 и L_3 , можно сделать некоторые важные выводы.

Во-первых, поскольку R больше L_1 (условная граница начала проявления квантовых эффектов Si), существенно больше L_2 и много больше L_3 , то модель сплошной среды достаточно (пока еще) справедлива и применима.

Во-вторых, однако, имеет место следующее. Пусть при расчете используется сетка в N узлов. Тогда шаг сетки $d = R/N$. При $R = 100 \text{ нм}$ и $N = 100$ имеем $d = 1 \text{ нм}$. Таким образом, шаг сетки d меньше L_1 , сравним с L_2 и больше L_3 .

При стремлении увеличить точность расчета в “классических” случаях (бифуркационные ситуации оставим в стороне) следует увеличить N , например до 1000 узлов. В этом случае шаг сетки d равен 0.1 нм, сравним с размером атома кремния L_3 и впятеро меньше L_2 , т.е. при построении сетки каждые 4 узла из 5 попадают в межатомное пространство кристаллической решетки.

Таким образом, становится неопределенным, какой именно процесс моделируется. Вообще говоря, эти рассуждения не вполне корректны, поскольку при использовании модели сплошной среды предполагается “усреднение” вещественной субстанции, в которой нет ни атомов, ни их группировок в решетке, и где можно формулировать непрерывную дифференциальную задачу, в которой процессы описываются дифференциальными уравнениями, например диффузии, с эмпирическими коэффициентами, полученными из реалити (стандартный или напряженный кремний, температура и т.п.).

Дискретизация непрерывной задачи (построение вычислительного алгоритма), естественно, вносит свои проблемы (аппроксимация, сходимость, единственность решения). Однако эти проблемы носят совершенно другой характер и не имеют ничего общего с проблемами адекватности модели сплошной среды в отношении к реальным процессам.

Резюмируя вышесказанное, можно констатировать следующее. В целом модель сплошной среды на размерах 100 нм еще достаточно корректна, но локальное моделирование структур уже требует специального анализа и осторожности при интерпретации полученных численных результатов.

Современные технологии позволяют создавать НЭМС с размерами элементов менее 10 нм. Так, в НЭМС-транзисторах применяются двухслойные подзатворные диэлектрики. Первый слой — термический диоксид кремния SiO_2 толщиной 1 нм и менее. Второй слой — нитрид кремния Si_3N_4 (или смесь оксида и нитрида) имеет примерно аналогичную толщину. При таких размерах точность расчета процесса оксидирования в рамках модели сплошной среды становится весьма сомнительной. Требуется использование более сложных физико-математических моделей и реализующих их вычислительных алгоритмов.

Переход же к квантово-механической модели, с необходимостью построения операторов Гамильтона и решения уравнения Шредингера, потребует создания новых теоретических методов, вычислительных алгоритмов и применения суперкомпьютеров высокой мощности.

10. Заключение. В работе проведено компьютерное моделирование одного из важных технологических процессов, применяемых при конструировании новых полупроводниковых материалов с заданными электрофизическими свойствами, — процесса имплантации легирующих примесей в базовую подложку кремния с непланарной поверхностью.

Исследовано влияние параметров процесса (прицельного угла и энергии имплантации) на распределения концентраций примесей фосфора, бора и мышьяка в кремнии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Тарнавский Г.А., Анищик В.С.* Инструментарий NanoMod компьютерной поддержки проектирования наноструктурированных полупроводниковых материалов // Вычислительные методы и программирование. 2009. **10**, № 1. 180–186.
2. *Тарнавский Г.А., Анищик В.С.* Решатели процессорной системы программного комплекса NanoMod // Нано- и микросистемная техника. 2009. № 4. 6–13.
3. *Runge H.* Distribution of implanted ions under arbitrarily shaped mask // Phys. Stat. Sol., 1977. **39(a)**. 595–607.
4. *Furikawa S., Matsumura H., and Ishiwara H.* Theoretical consideration on lateral spread of implanted ions // Jap. J. Appl. Phys. 1972. **11**, N 2. 134–142.
5. *Monfray S., Skotnicki T., Tavel B., Morand Y., Descobes S., Talbot A., Duterte D., Leverd F., Le Fricc Y., Palla R., Pantel R., Haond M., Nier M.-E., Vizios C., Louis D.* Highly-performant 38 nm SON (Silicon-On-Nothing) P-MOSFETs with 9 nm-thick channels // IEEE SOI Conference Proc. 2002. 22–25.
6. *Адамов Д.Ю., Матвеевко О.С.* Усовершенствование структур МОП-транзисторов в нанометровых технологиях // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 2. 53–63.
7. *Мустафаев Ар.Г., Мустафаев Аб.Г.* Проблемы масштабирования затворного диэлектрика для МОП-технологий // Нано- и микросистемная техника. 2008. № 4. 17–22.

Поступила в редакцию
02.09.2009