

APSYS 软件基础包及可选模块

一个完整的 APSYS 软件包含 **基础软件包** 和 **若干可选模块**

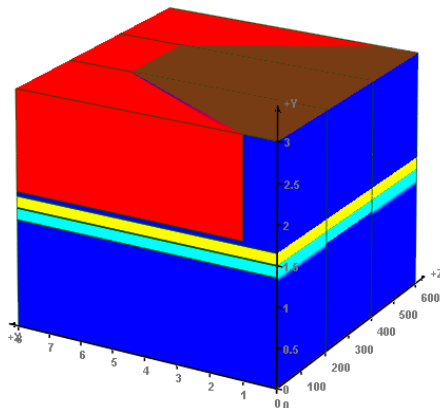
基础软件包:

- A. APSYS Basic [non-QW Edition] **无量子力学计算**
- B. APSYS Basic [Quantum-Well (QW) Edition] **包含量子力学计算**

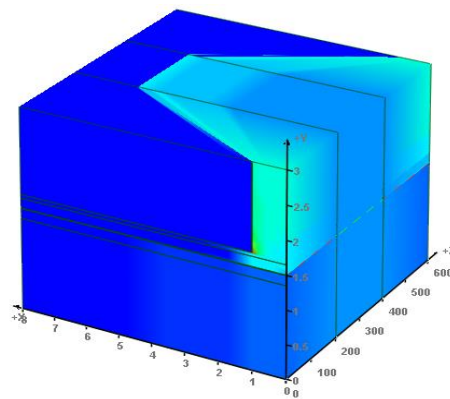
可选模块:

1. 3D Current Flow / Mesh Connectivity

进行半导体器件 3D 结构的构建和网格连接, 实现器件在三个维度上的电流传输和光学效应, 给出器件物理特性的 3D 分布。



材料结构图

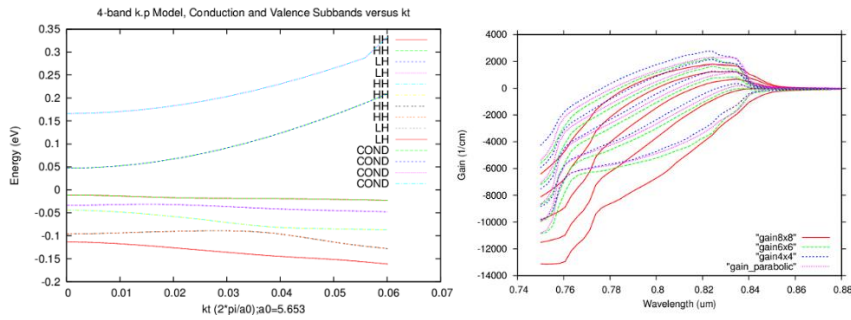


电流分布图

2. Advanced k.p model /Plane Orientations (仅基础软件包 B 可选, A 不可选)

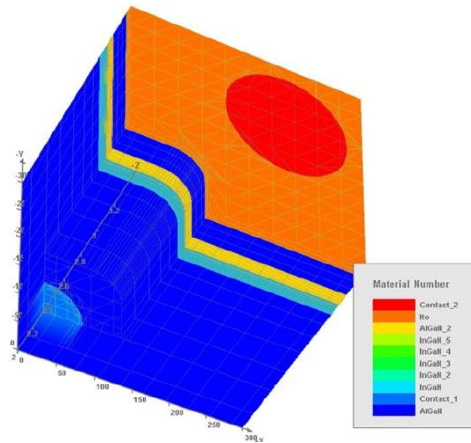
通过包含导带和价带(HH, LH, SO)的 **8x8 k·p 理论**来计算能带, 一般使用在 wurtzite

材料如 GaN 基多量子阱结构。



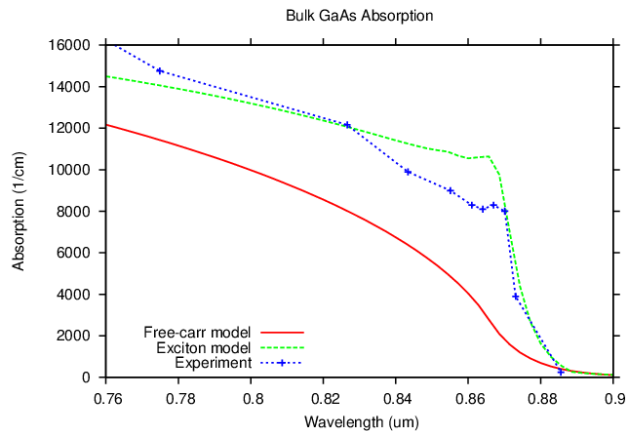
3.CSUPREM Builder / Mesh Interface

通过使用 CSUPREM 软件具有的网格划分以及沉积、刻蚀、材料替换等功能实现 Layerbuilder3d 所不能完成的复杂 3D 结构的构建，并输出到 APSYS 或 PICS3D 软件进行光电特性的仿真。



4. Exciton/Manybody Gain 激子/多体效应增益

考虑激子吸收和多体效应对材料增益的影响。多体效应表现为等离子体屏蔽 (plasma screening) , 能带重组 (bandgap renormalization) , 带间库伦引力 (interband Coulomb attraction) 以及 载流子相互散射 (carrier-carrier scattering) ,



5. FDTD Interface (Acceleware)

FDTD 是一种求解麦克斯韦方程组的数学方法，用于精确计算电磁波在器件中的传播，得到光波能量分布等信息。

Apsys 软件提供了 3 个 FDTD 求解器接口，此接口的 FDTD 求解器由 Acceleware 公司开发，且支持硬件 GPU 加速器。

6. FDTD Interface (MEEP)

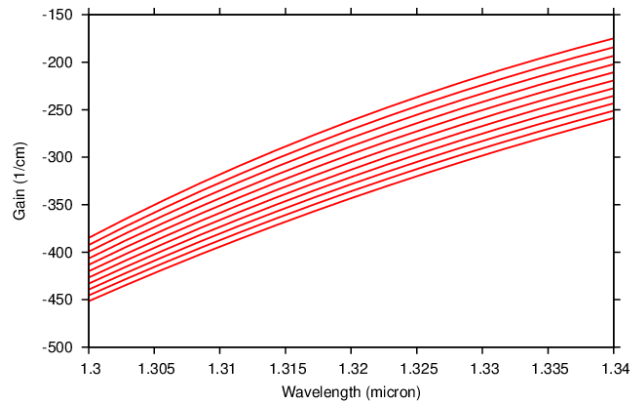
FDTD 求解器及和 Apsys 软件的接口，MIT 开发。

7. FDTD Interface (Crosslight)

FDTD 求解器及和 Apsys 软件的接口，由 Crosslight 自主开发。

8. Franz-Keldysh (Bulk modulator)

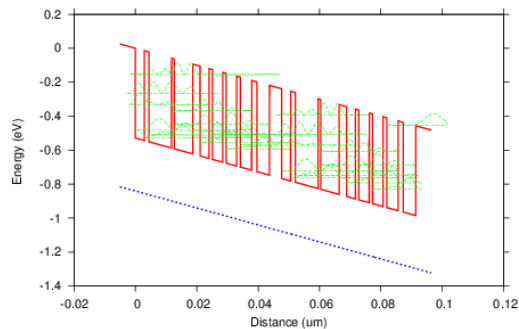
弗兰之-克尔德什效应 (Franz-Keldysh effect) 模型，加电场时，半导体的光吸收发生变化，在大块和均匀的半导体中出现，用作电吸收调节器。



电压不同导致材料吸收谱发生变化

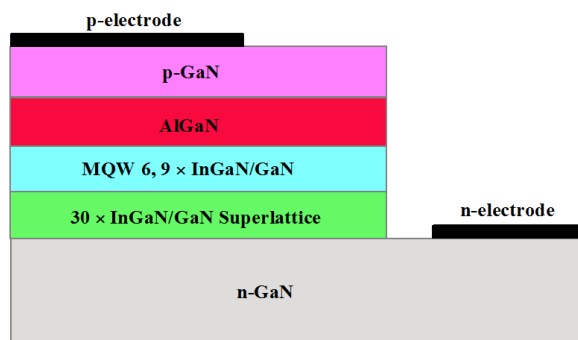
9. Intersubband (QWIP/QCL) (仅基础软件包 B 可选, A 不可选)

子带间跃迁，用于量子阱红外光探测器 (QWIP, Apsys 软件) 和量子级联激光器 (Cascade Laser, Pics3D 软件)。



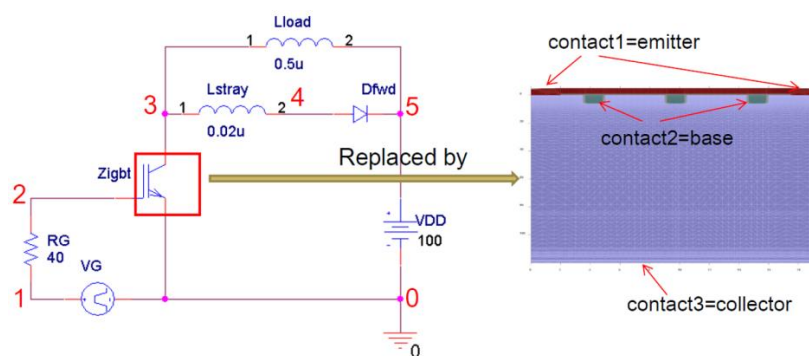
10. LED model

针对 LED 的仿真模型。

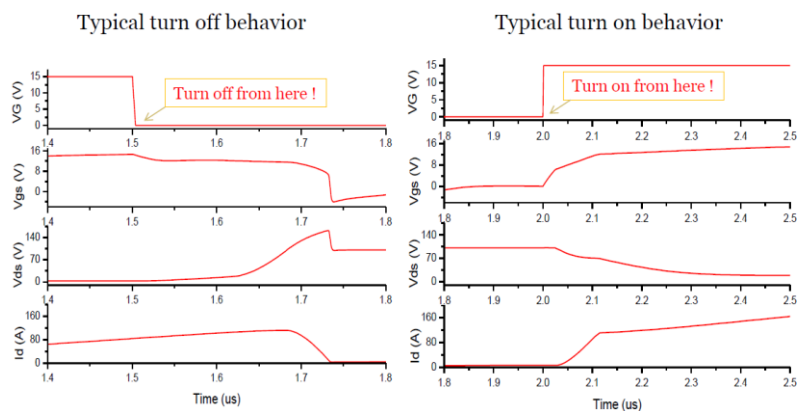


11. Mixed-Mode Simulation

将**器件数值模拟**与包含其他分立器件的 **spice 电路模拟**相结合，可以同时分析**器件内部物理量变化**和观测**电路中任意节点处的电流电压**等的变化。



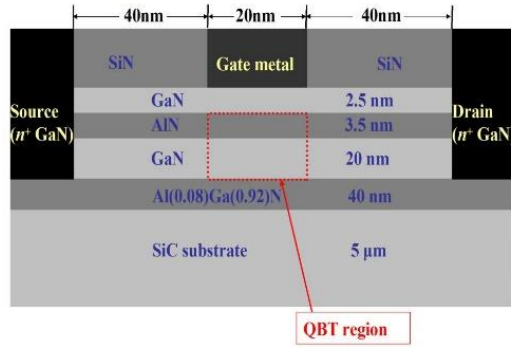
解析电路和数值器件结合



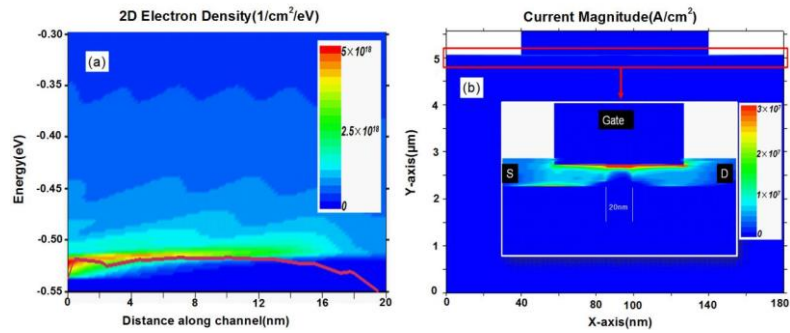
分析电路上各节点 (node) 上的电流电压

12. NEGF 非平衡格林函数 (必需 Quantum Tunneling/Transport 模块)

用于计算晶体管超短沟道 (小于 20nm) 中的**弹道运输**。



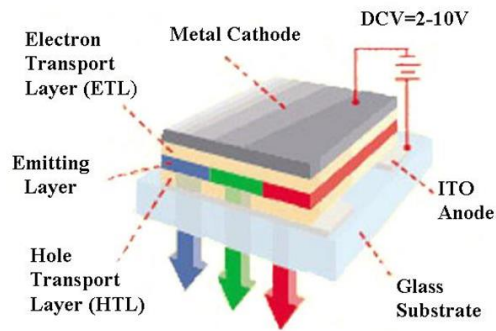
a)超短沟道双异质结 GaN 基 HEMT 结构示意图



b)NEGF 方法计算的沿着沟道方向电子密度能量谱 c)整个器件内部电流密度分布。

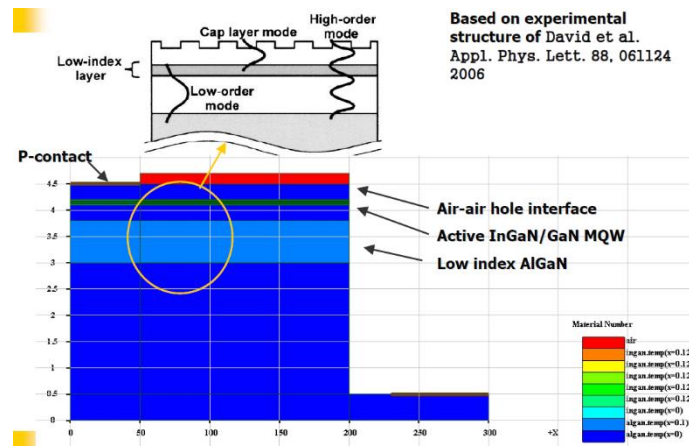
13. OLED/Polymer Semiconductors

用于仿真有机半导体材料构成的器件，特别是有机发光二极管。



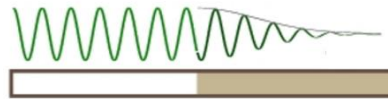
14. Photonic Crystal LED (PhCLED)

用于仿真具有光子晶体结构的 LED。

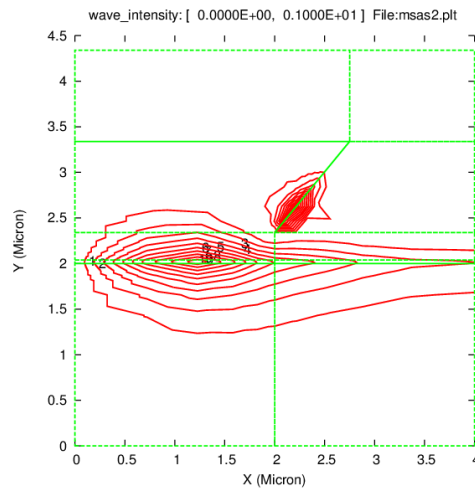


15. PML/EEIM (radiative/leaky modes) (必需 Waveguide/Eigensolver 模块)

1) PML 用于设置光波在边界处的完美匹配吸收层，需要和多个模块配合使用，如 Micro-cavity laser model 和 APSYS 软件中使用的 FDTD 模块。

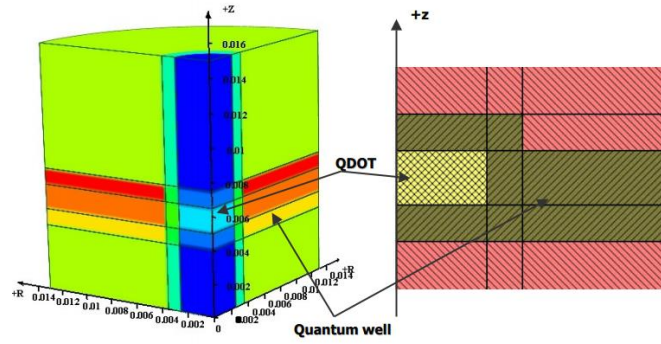


2) 软件基础包默认采用 EIM 模型仅考虑限制模，不考虑辐射模，而 EEIM 既考虑限制模，又考虑辐射模。如下图所示，光从有源区泄露到波导限制层以外的高折射率区域。

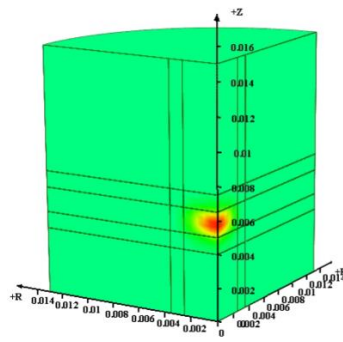


16. Quantum Dots (仅基础软件包 B 可选, A 不可选)

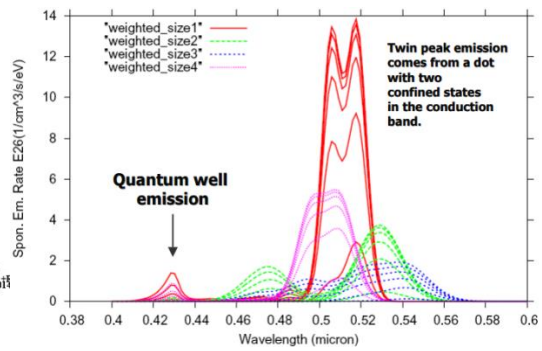
针对在量子阱中存在量子点的结构，可计算不同密度、尺寸和形状的量子点内的量子态、跃迁及其对激射波长的影响。



a) 埋在量子阱中的量子点



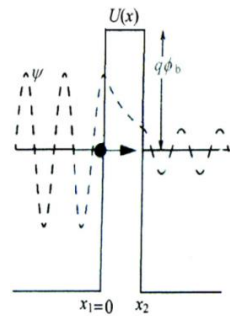
b) 量子点发光



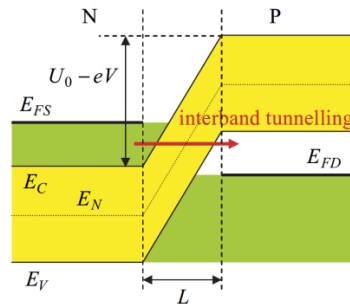
c) 发光光谱 (体现量子点和量子阱的竞争)

17. Quantum Tunneling/Transport

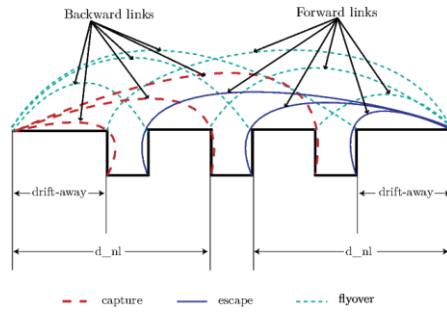
(1) 考虑载流子带内、带间隧穿；(2) 载流子在多量子阱区域的运输，包含载流子的飞跃、束缚、隧穿和逃逸等一系列物理现象。



a) 带内隧穿



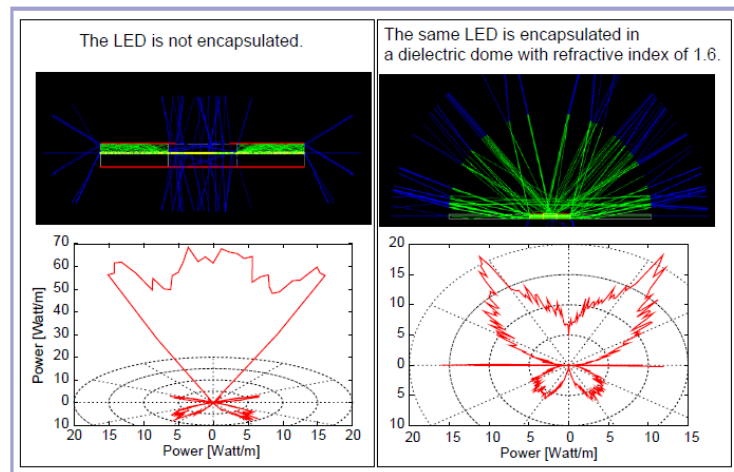
b) 带间隧穿



c)量子运输

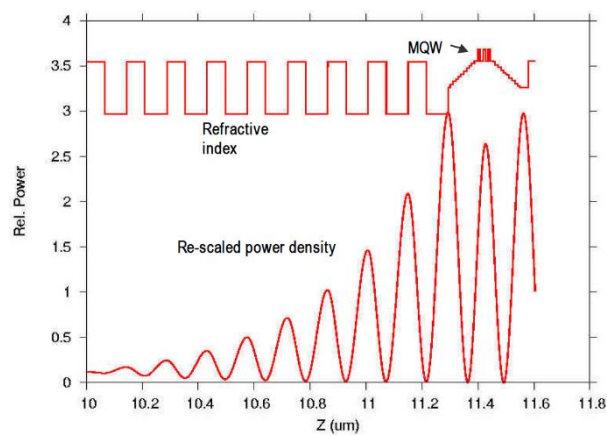
18. Ray Tracing

根据几何光学原理，追踪并显示 LED 自发辐射光子在 LED 内部不同界面处的反射、透射和吸收过程，计算 a) LED 的光输出效率、外量子效率和远场分布; b)入射光在任意结构探测器内部的衰减并得到光吸收分布。



19. Resonant Cavity LED (RCLED)

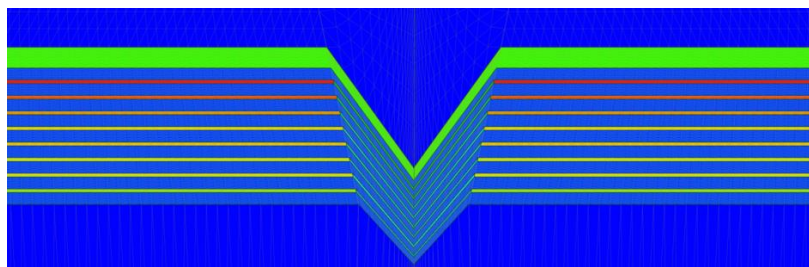
用于仿真具有共振腔结构的 LED。



RCLED 腔内 MQW 区域处的驻波与折射率

20. Rotated MQW (仅基础软件包 B 可选, A 不可选)

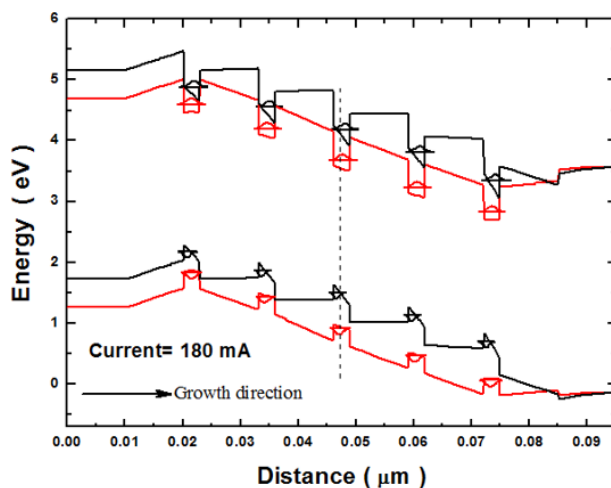
用于计算生长在**任意晶面**上的多量子阱结构中的载流子传输和复合过程,例如,InGaN多量子阱发光二极管 V-shaped pits 中的多量子阱结构。



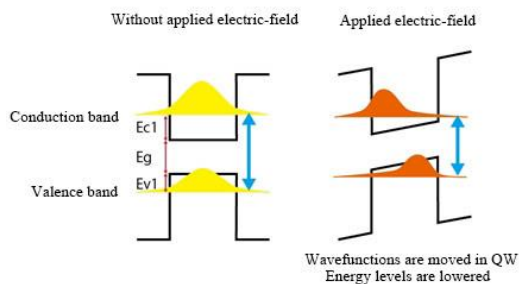
21. Self-consistent MQW/Piezo (仅基础软件包 B 可选, A 不可选)

自洽的量子阱载流子浓度模型。在**外加电场**对量子区域的**电子空穴能级和态密度**等影响明显的情况下,此模块显得尤为重要。主要针对以下 3 种情况:

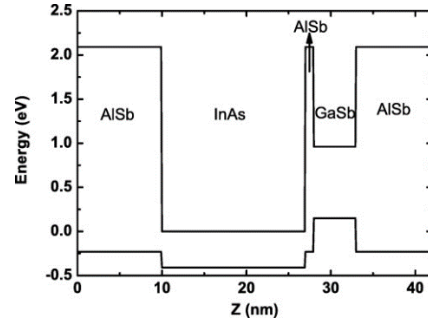
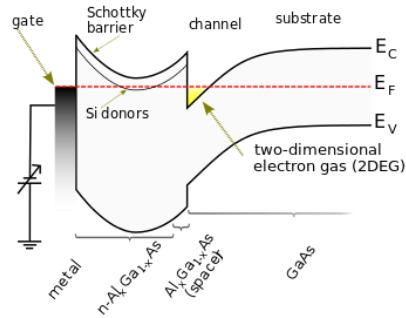
第一种情况针对 GaN 基半导体材料多量子阱结构,涉及量子阱界面处极化电荷的计算以及自洽地计算由极化电荷引起的能带倾斜、波函数移动、载流子分布等效应对器件光电性能的影响。



第二种情况针对 quantum confined stark effect(QCSE 量子限制斯塔克效应),此时量子阱材料的发射谱和吸收谱受到外加偏压(或电场)明显的影响。



第三种情况针对普遍意义上的复杂量子结构,如非对称量子阱和超晶格结构等。



22. Thermal Option

通过设置多种**热边界条件**，考虑复合热、焦耳热、光吸收、汤姆逊热、泊耳帖热等**热源**以及热量的**传输**，并考虑**材料参数和模型参数随温度的变化**，给出 PI 曲线的 rollover 现象、器件的温度分布以及热效应对激射波长、功率的影响。

23. Waveguide/Eigensolver

默认情况下，Apsys 软件中的入射光进入内部结构后的光强分布由薄膜传输矩阵(Thin Film Transfer Matrix) 计算获得。

此模块用于激活 **有效折射率方法 (EIM)** 方法，并利用优化的**Arnoldi**稀疏矩阵求解器求解任意形状横截面的光学模式 (包含基模和高级模的光强分布)。

激活命令：`sor_par`。

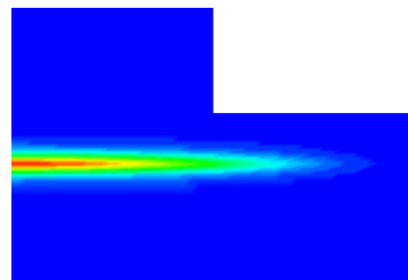
范例：`apsys_examples\photo_detector\waveguide_pd\`。

请注意：

- 1) 此模块只用于求解2D光学模式，**不考虑**纵向 (longitudinal) 模式；
- 2) 从模块只用来求解光波的模式，如果考虑光波导的入射光，则需搭配**Advanced Optics Model**模块，此时的入射光在内部的光强分布直接由此模块计算得到的光学模式得到。



波导结构



光模式 (基模)

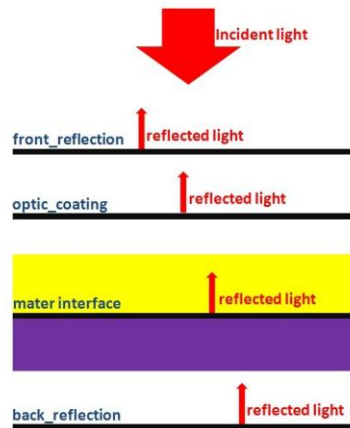
24. Advanced Optics Model

设置入射光的必需模块，适用于半导体光电传感器，半导体光探测器和太阳能电池等。

激活命令：`light_power`。

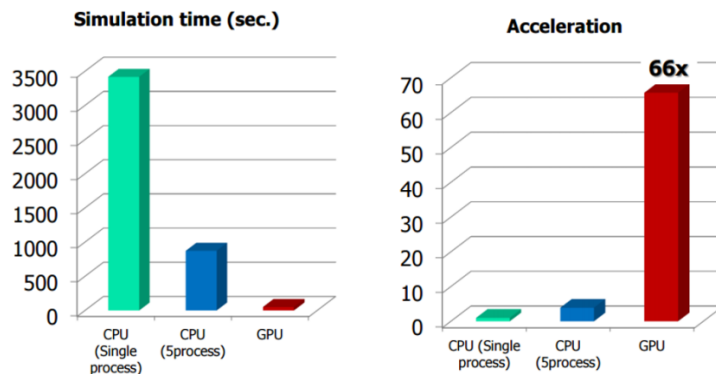
示意图：

Reflection regime(sequence) in device simulator



25. GPU Acceleration

使用**显卡中的 GPU** 处理**矩阵运算和矢量运算**,能够有效提高巨量网格数量(大于 10 万)情况下的计算速度。

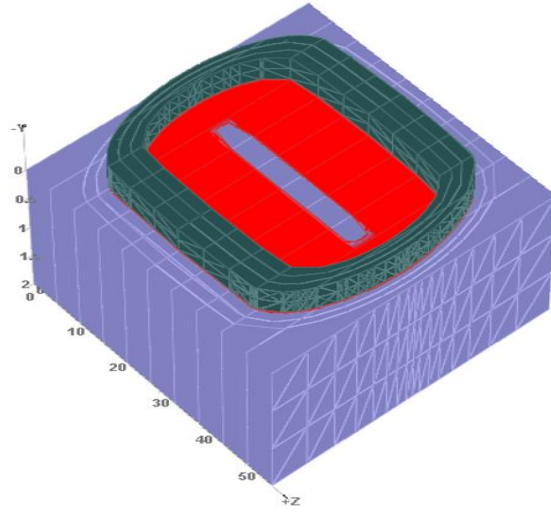


26. Type II MQW Transport

II 类超晶格结构的载流子**隧穿运输**模型。此模型具有简化方式,即使用软件包自带的 effective miniband 模型取代。

27. 3D Bent Mesh (必需 CSUPREM Builder / Mesh Interface 和 3D Current Flow / Mesh Connectivity 模块)

用于具有**弧面等弯面形状**的三维有限元网格的构建。



APSYS 软件**基础包**涵盖内容

基础软件包：

A. APSYS Basic [non-QW Edition] **无量子力学计算**

B. APSYS Basic [Quantum-Well (QW) Edition] **包含量子力学计算**

基础包涵盖内容：

类别	详细	基础包
一. 基本方程和自治	1.1 稳态和瞬态漂移扩散方程，包含 a)泊松方程和 b)电子空穴流连续性方程，用于计算空间电荷、电场电势、载流子分布以及电流密度分布等；	A B
	1.2 量子力学波动方程	B
	1.3 标量波动方程（光波导器件）	A B
	1.4 热载流子能量传输方程（hydrodynamic model）；	A B
二. 基本物理模型	2.1 深能级缺陷和缺陷动力学，包含复合(recombination)模型(SRH,Auger等)；	A B
	2.2 光的多模式分析模型；	A B
	2.3 Type I 和 II 能带排列模型	A B
	2.4 瞬态大信号仿真模型	A B
	2.5 依赖于掺杂浓度的载流子寿命模型	A B
	2.6 有机物半导体模型	A B
	2.7 纤维锌矿(wurtzite)材料的极化和部分极化理论	A B
	2.8 几何光学光线追踪计算	A B
	2.9 有限时域差分(FDTD)电磁波传播计算接口	A B
	2.10 光学涂层模型	A B
	2.11 AC 分析模型，用于分析器件的交流小信号响应；	A B
	2.12 价带混合（Valance Mixing）量子阱 k.p 能带模型模型；	B
	2.13 包含应力效应的量子阱 k.p 能带模型；	B
	2.14 复杂量子阱区域（非对称势垒单量子阱及任意能带分布的多量子阱）模型；	B
	2.15 非线性增益抑制模型，用于处理随光子密度增加光增益趋向减小的现象；	B
	2.16 多种增益展宽模型；	B

	2.17 表面态和表面效应模型；	A	B
	2.18 Poole-Frenkel 绝缘体导电模型；	A	B
	2.19 载流子之间和载流子-光子散射模型；		B
	2.20 77K 低温仿真模型；	A	B
	2.21 具有电场依赖性的迁移率模型；	A	B
	2.22 依赖于温度的材料参数模型；	A	B
	2.23 3D 结构和电流连接模块，实现边 3D 结构的构建，以及给出电流及光场、电场、载流子和能带等分布的 3D 分布；	A	B
三 . 材料库	3.1 包含完善的根据导电性进行分类的单质和化合物材料库；	A	B
	3.2 软件自带材料库完全开放，能够自由修改、新建和删除材料定义；	A	B
	3.3 用户能够自行建立材料库；	A	B
	3.4 二元以上化合物材料针对不同衬底进行了区分；	A	B
	3.5 包含多种有机半导体材料，并提供有机半导体材料的创建工具；	A	B
四 . 材料模型	4.1 折射率模型，包含各种影响折射率变化的因素如载流子浓度和温度等；	A	B
	4.2 异质结界面上的能带偏移 (band offset) 模型，此模型有益于准确的能带排列；	A	B
	4.3 三元及以上的化合物材料参数的插值模型；	A	B
	4.4 迁移率模型，依赖于电场强度，掺杂浓度，温度和 trap 等；	A	B
	4.5 用于计算雪崩击穿的碰撞离化模型；	A	B
	4.6 完整的 Wurtzite 材料模型。包含：体材料能带结构，Wurtzite 偶极矩，量子阱中的价带混合(valance mixing)，基于第一性原理的包含压力效应的极化和表面电荷，无极性(non-polar)和半极性(semi-polar)等。		B
	4.7 严格的 k.p 能带理论 (4×4 和 8×8) 适用于 Zinc Blende 和 Wurtzite 材料，包含 GaAs, InP, AlAs, GaSb, AlSb, InAs, GaP, AlP, InSb, ZnS, ZnSe, ZnTe, CdS, CdSe, CdTe, InN, GaN, AlN, 以及相关的三元，四元和五元化合物等。		B
	4.8 量子阱和量子点模型。包含：带间及自带间光跃迁模型，自治的载流子密度模型，折射率模型，包含多体库伦作用的光增益模型，局部增益和光限制模型，激子电吸收模型，Franz-Keldysh 效应，量子点带间跃迁模型，应力量子阱中的能带偏移模型，带间弛豫时间和增益展宽模型，等等。		B
	4.9 有机半导体材料模型，包括 Poole-Frenkel 电场相关迁移率模型，单重态及三重态激子扩散模型，Holstein 激子复合模型等；	A	B
五 . 图形建模工具	5.1 用于建立行列式外延和侧向 2D 和 3D 结构的 LayerBuilder/Layer3D 图形工具，具有建模速度快的特点；	A	B
	5.2 用于建立任性形状外延和侧向 2D 和 3D 结构的 GeoEditor/GeoEditor3D 图形工具，具有建立复杂结构的能力；	A	B

六. 项目管理工具

6.1 SimuPics3D 高效项目管理工具，用于调用图形界面工具，编辑脚本文件以及管理批量计算项目等； **A B**

七. 数据输出工具及功能

7.1 用于产生.ps 格式图形文件的 GnuPlot 工具和用于查看.ps 格式的 GhostView 工具； **A B**

7.2 CrosslightView 图形工具，用于查看和分析 Pics3D 软件的输出文件，具有优秀的器件结构内部剖析展示能力和器件性能曲线分析能力，能够稳定高效地帮助器件研究人员得到专业级的图形结果； **A B**

7.3 器件内部物理量的 1D/2D/3D 分布图，能处理的量有： **A B**

- ✓ 吸收率
 - ✓ 受主杂质浓度
 - ✓ 施主杂质浓度
 - ✓ 总掺杂浓度
 - ✓ 温度
 - ✓ 能带
 - ✓ 电子浓度
 - ✓ 空穴浓度
 - ✓ 导带
 - ✓ 价带
 - ✓ 位移电流(总电流，x y z 分量)
 - ✓ 电子电流(总电流，x y z 分量)
 - ✓ 电子能量
 - ✓ 电子准费米能级
 - ✓ 电子迁移率
 - ✓ 激子密度(单激子，偶极子，三激子)
 - ✓ 电场(总值，x y z 分量)
 - ✓ 热流(总值，x y z 分量)
 - ✓ 空穴电流(总电流，x y z 分量)
 - ✓ 空穴准费米能级
 - ✓ 空穴迁移率
 - ✓ 碰撞离化参数
 - ✓ 入射光强
 - ✓ 折射率
 - ✓ 带间泵浦
 - ✓ 增益
 - ✓ 磁场磁势
 - ✓ 固定电荷
 - ✓ 陷阱密度
 - ✓ 陷阱能级
 - ✓ 被俘获电子浓度
 - ✓ 光增益
 - ✓ 各种热源(焦耳，汤姆森，帕尔贴，复合，辐射等)
 - ✓ 压电应力
 - ✓ 电势
 - ✓ 量子点中的电子空穴浓度
 - ✓ 参与复合的电子空穴浓度
 - ✓ 各种复合率(俄歇，热，辐射，SRH，受激)
 - ✓ 子能带中电子空穴浓度
 - ✓ 空间电荷
 - ✓ 应力分量
 - ✓ 电流(总值，x y z 分量)
-

✓ 隧穿增强系数

7.4 和外偏置(如电压、电流和入射光等)相关的曲线图(如 IV 曲线等), **A B**

能处理的量有:

- ✓ 光强
- ✓ 电极电流
- ✓ LED 发光功率
- ✓ 电极上的位移电流
- ✓ 有效折射率
- ✓ 激光发射功率效率
- ✓ 电极上的电子或者空穴电流
- ✓ LED 内量子效率 (IQE)
- ✓ LED 外量子效率 (EQE)
- ✓ LED 电光转换效率
- ✓ LED 出射光功率
- ✓ LED 自发光源功率
- ✓ 入射光总功率
- ✓ 探测器外量子效率(PD efficiency)
- ✓ 探测器响应率(PD responsivity)
- ✓ 峰值波长增益
- ✓ 激光功率(总值以及前后面)
- ✓ 空间电荷
- ✓ 温度最大值
- ✓ 时间
- ✓ 热源发热值(总值,焦耳,汤姆森,帕尔贴,复合,辐射等)
- ✓ 隧穿增强系数
- ✓ 电极电压
- ✓ 激光发射波长
- ✓ 光泵浦的入射光波长

7.5 能够导出所有图形中的数据,供用户使用其它工具作图; **A B**

7.6 能够自由绑定不同曲线于一张图中; **A B**

八. 帮助文档

8.1 Apsys 软件英文手册; **A B**

8.2 中文帮助文档(基本使用、图形界面帮助文档和常见问题解答等); **A B**

九. 其它功能

9.1 多种稀疏矩阵求解器的切换功能; **A B**

9.2 运用 Intel MKL 进行自动 CPU 并行计算功能; **A B**

9.3 根据物理量的梯度变化进行自动网格优化,以及手动设置进行网格优化功能; **A B**

9.4 多种提高宽禁带半导体器件仿真的数值收敛性的方法(慢瞬态、禁带变窄、局部掺杂调整以及牛顿迭代控制等)。 **A B**
