



PICS3D 软件介绍

编辑: 盛阳 夏长生
上海市中山北路 2790 号 906 室
邮编: 200063
电话: +86 21-51815367-22
手机: 18017219009
邮箱: shengyang@crosslight.com.cn
传真: +86 21-51815365

目录

1 基本介绍.....	3
1.1 物理方程.....	3
1.2 物理模型.....	3
1.3 图形用户界面(GUI).....	4
1.4 器件应用.....	5
2 仿真环境.....	6
3 操作界面.....	7
4 编程方式.....	9
5 参数输入方式.....	11
5.1 在建结构的图形界面中输入参数.....	11
5.2 在脚本文件编辑界面中输入参数.....	11
6 数据输出形式.....	13
6.1 和位置相关的线性分布.....	13
6.2 和 bias 相关的变量关系图.....	14
6.3 二维空间分布图.....	15
6.4 三维空间分布图.....	17
7 材料库.....	20
7.1 导体材料.....	20
7.2 绝缘体材料.....	20
7.3 单质半导体材料.....	20
7.4 二元化合物半导体材料.....	20
7.5 三元化合物半导体材料.....	20
7.6 四元化合物半导体材料.....	20
7.7 五元化合物半导体材料.....	20
7.8 有机半导体材料.....	20
8 材料模型.....	22

1 基本介绍

先进的 3D 光电集成电路仿真软件，是一款用于模拟面射及边射型激光二极管、半导体光放大器和其他类似的有源波导器件的最新 3D 仿真软件，2D 和 3D 半导体方程式(例如：漂移扩散、泊松方程.....等等)与各光学模型在侧向及纵向上配对，光学特性如：量子阱、量子线及量子点的光学增益和自射率均被最优化计算。

PICS3D 软件是 LASTIP 软件在第三维方向上的延展，目的在于一方面能够帮助器件设计者优化现有的器件结构，另一方面也能对新的设计思想进行原型验证。PICS3D 软件的重要性在于，3D 方向上的扩展对很多特定的激光器件的仿真至关重要。

1.1 物理方程

PICS3D 软件求解的基本物理方程为以下 3D 物理方程：

- 泊松方程
- 电子流和空穴流连续性方程
- 复杂二维波方程
- 光子速率方程
- 热流方程

1.2 物理模型

PICS3D 软件中包含了广泛的应用于半导体激光器仿真的物理模型：

- 包含应力效应的量子阱 k.p 能带理论
- 量子阱自洽计算模型
- 纤维锌矿(wurtzite)材料的极化和部分极化理论
- 非线性增益抑制模型
- 复合(recombination)模型(SRH, Auger 等)
- 量子隧穿和量子输运，包括高级的 miniband, Type II 能带等
- 热传输模型
- 价带混合效应(valence mixing effects)
- 成熟的增益展宽函数

- 深能级缺陷和缺陷动力学
- 表面态和表面效应
- Poole-Frenkel 绝缘体导电模型
- 载流子之间和载流子-光子散射
- 77K 低温仿真模型
- 光的多模式分析
- 具有电场依赖性的迁移率模型
- 完全耦合的牛顿方法
- 大量的材料模型
- 依赖于温度的材料参数模型
- 灵活的材料参数定义方式
- 诸多光模式纵向模型(longitudinal modeling)
- 完善的 VCSEL 理论模型
- 模式谱和调制响应

一直以来，Crosslight 公司秉承着一个传统，也就是物理模型会根据半导体器件的前沿发展趋势进行不断的更新和修正。

1.3 图形用户界面(GUI)

作为一个完善的 Windows 仿真平台，PICS3D 软件提供了完整的建模，脚本编辑，结果查看，项目管理等图形用户界面：



SimuPics3D 便捷完整的项目管理界面,PICS3D 软件相关的集成管理和编辑

界面。



LayerBuilder(2D/3D) 用于类似于激光器件的薄膜层状结构的搭建。



GeoEditor(2D/3D) 以三角形，任意四边形和弧形边缘为基础搭建较为复杂的几何结构。可以新建结构，也可以在 LayerBuilder 产生的.geo 文件基础上改动结构。



CrosslightView(2D/3D) 用于查看 Csuprem/APSYS/LASTIP/PICS3D

/PROCOTM 等工艺和器件仿真完整计算结果的易用便捷的工具，支持图形数据导出。

1.4 器件应用

得益于完善的物理模型和多年的客户积累，PICS3D 软件被广泛运用于各类有源和无源波导半导体器件中，主要包含：

- 各类 DFB 和 DBR 半导体激光器
- 垂直腔表面发射激光器(VCSELs)
- 可调谐激光器
- 集成调制器
- 半导体光放大器(SOA)
- 超辐射发光而激光(Superluminescent diodes: SLED)
- 波导光探测器
- 光泵浦半导体激光器
- 外腔半导体激光器
- 环状半导体激光器
- 增益耦合光栅
- 高阶光栅
- 具有纵向空穴烧孔(hole burning)效应的高功率泵浦激光器

此外，PICS3D 软件能够得心应手地处理器件之间的组合仿真以及器件结合外电路的仿真，为新类型器件和新结构器件的研究和验证带来了巨大的便捷性。

2 仿真环境

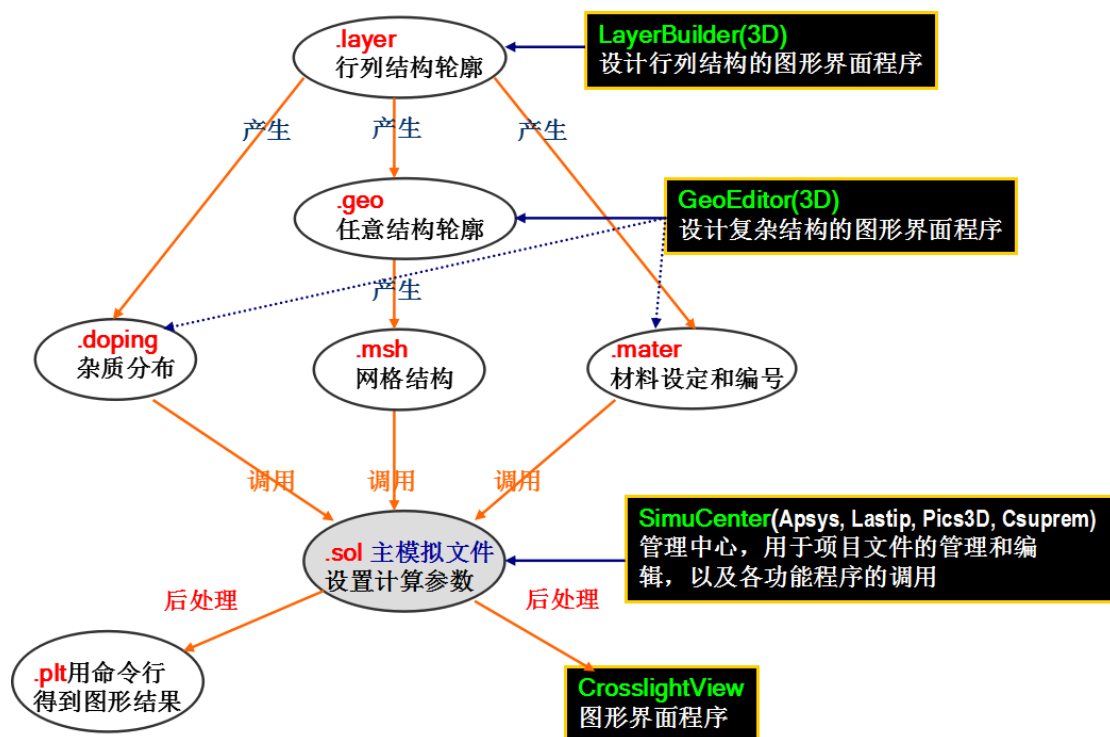
PICS3D 软件的核心程序和图形界面程序运行在 Windows 环境下，支持 WinXP 及以后的所有版本，同时具备 32bit 和 64bit 版本。

也可以运行在 linux 系统环境下，但是只有核心程序而没有图形界面程序。用户可以通过手工编辑项目脚本进行仿真，结果分析可以通过软件自带的导出数据功能在其它画图软件中呈现。

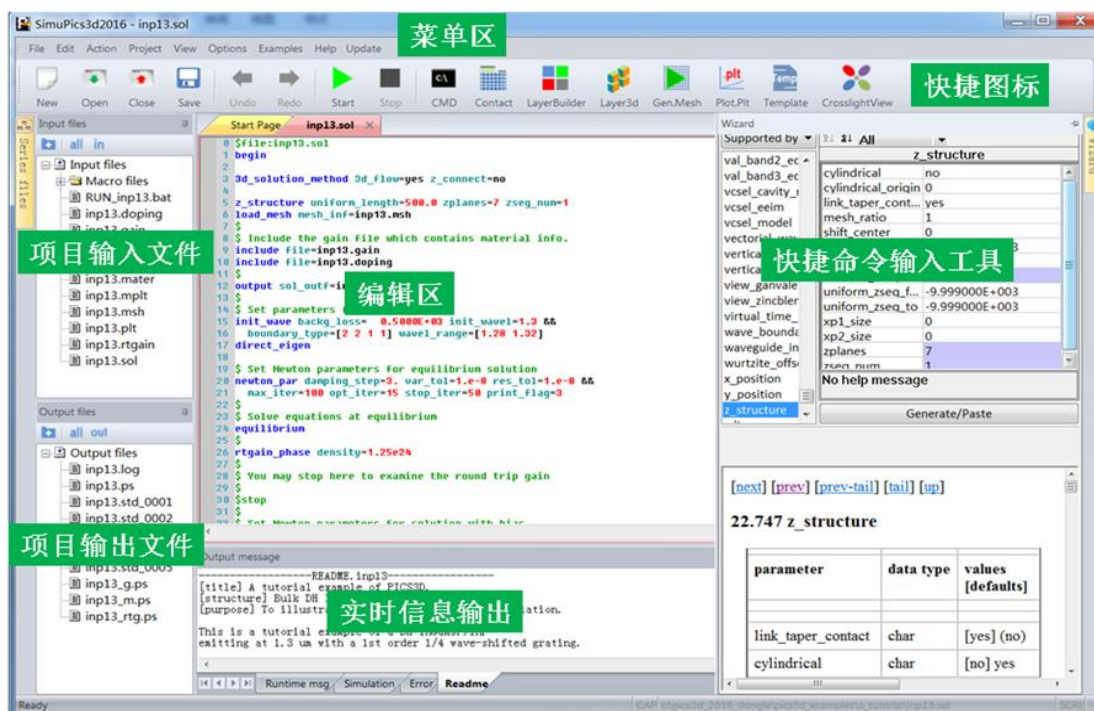
PICS3D 软件还支持 GPU 显卡加速计算，在器件的有限元网格较大导致计算量巨大的情况下，GPU 加速具有较大的优势。

3 操作界面

PICS3D 软件的图形界面程序和脚本文件基本关系图如下：



其中的 SimuCenter(SimuApsys/SimuLastip/SimuPics3D) 是整个项目的管理中心，界面如下：



在 SimuCenter 中可以实现整个项目的管理，包括调用结构编辑工具和输出结果查看工具等图形界面程序，编辑项目的输入文件脚本，以及快速添加或者修改命令等功能。

4 编程方式

PICS3D 软件的编程属于脚本编程,采用简洁的命令+参数设置的方式。而且在 PICS3D 的编辑界面中,脚本文件被自动解析,以颜色区分各种元素,以便使用者区分。

如下图所示：

```

$file:inp13.sol
begin

3d_solution_method 3d_flow=yes z_connect=no

z_structure uniform_length=500.0 zplanes=7 zseg_num=1
load_mesh mesh_inf=inp13.msh
$
$ Include the gain file which contains material info.
include file=inp13.gain
include file=inp13.doping
$
output sol_outf=inp13.out
$
$ Set parameters for wave equation
init_wave backg_loss= 0.5000E+03 init_wavel=1.3 &&
boundary_type=[2 2 1 1] wavel_range=[1.28 1.32]
direct_eigen

$ Set Newton parameters for equilibrium solution
newton_par damping_step=3. var_tol=1.e-8 res_tol=1.e-8 &&
max_iter=100 opt_iter=15 stop_iter=50 print_flag=3
$
$ Solve equations at equilibrium
equilibrium
$
rtgain_phase density=1.25e24
$
$ You may stop here to examine the round trip gain
$
$stop
$
$ Set Newton parameters for solution with bias
newton_par damping_step=1. var_tol=1.e-4 res_tol=1.e-4 &&
max_iter=50 opt_iter=15 stop_iter=9 print_flag=3

$ Ramp up bias voltage
scan var=voltage_1 value_to=-5.0 &&

```

其中：

>以\$符号开头的绿色行为注释行,核心程序将过滤这些行。注释行便于使用者进行备注。

>蓝色字体为“命令”的名称。

> 每一个命令会包含一些“参数”，用青色标注。

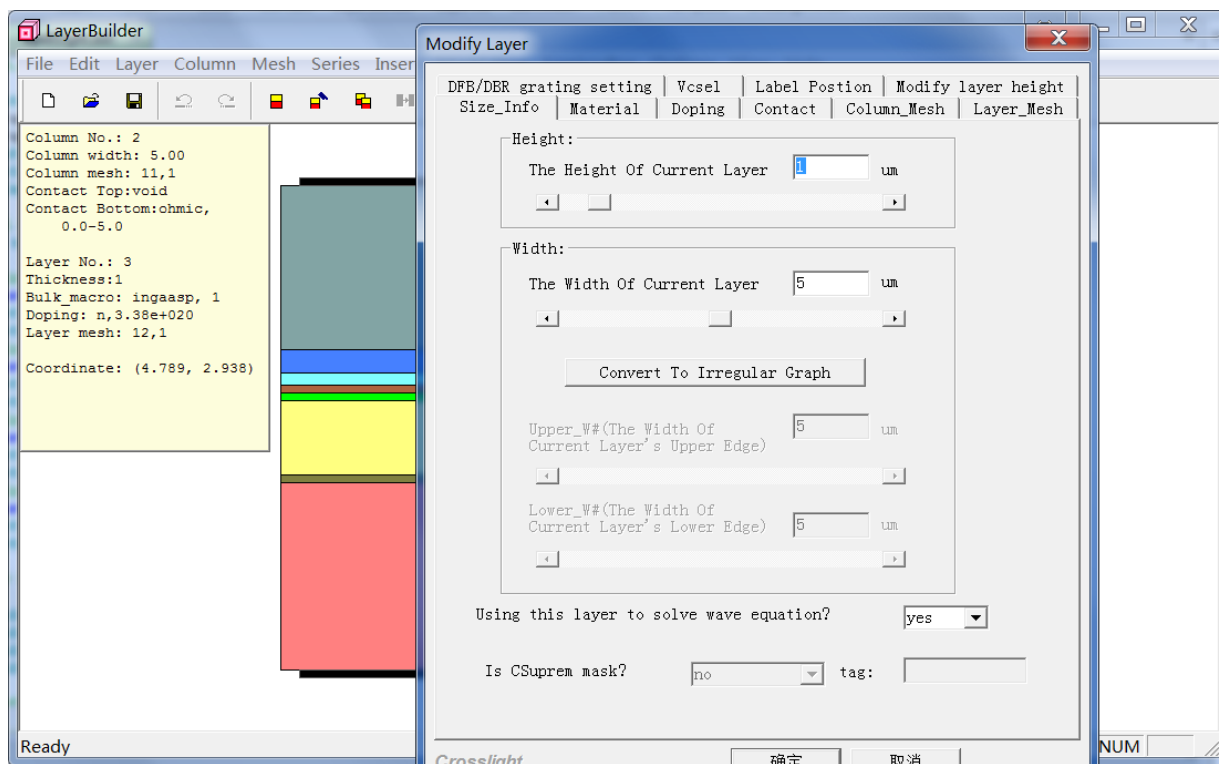
> “参数”的值如果是数字，则用红色标注，如果是字符串，则用黑色标注。

> 每一行的长度由于历史原因被限制在 80 个字符，因此需要“&&”作为续行符完成整个命令+参数的设置。

5 参数输入方式

5.1 在建结构的图形界面中输入参数

以 LayerBuilder 建结构为例：



用户可以在界面中输入结构，材料，掺杂，网格等参数。

5.2 在脚本文件编辑界面中输入参数

可以在 PICS3D 的编辑界面中直接手写输入参数。

也可以使用 PICS3D 界面右侧的“快捷命令输入工具”进行每个命令的参数输入和修改：

The screenshot shows a 'Wizard' window with a list of parameters on the left and a detailed view of the 'vcSEL_model' parameters on the right. The 'vcSEL_model' parameters are:

parameter	data type	values [defaults]
add_r_division	int	1
bessel_order	int	0
core_radius	float	7.5
eim_stw_method	char	min_loss
eim_zero	int	9999
independent_stw	char	no
index_cladding	int	1
index_core	float	3.2
long_ref_zseq	int	-9999
photon_fac	float	0.001
propagation_dir	char	y
rect_core_origin	float	0,0
rect_core_xrange	float	-9.9990000E+003

Below the parameter list, the help documentation for 'vcSEL_model' is displayed, including a table of parameters:

parameter	data type	values [defaults]
use_eim	char	[no],yes
rectangle_system	char	[no]
rect_symetric_x	char	[yes]
propagation_dir	char	[y],z
rect_lateral_model	char	[eim],bessel

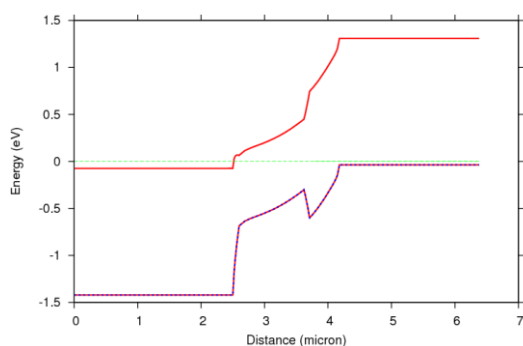
此工具能够自动列出命令所包含的所有可修改参数，并在其下方展示此命令的帮助文档。

6 数据输出形式

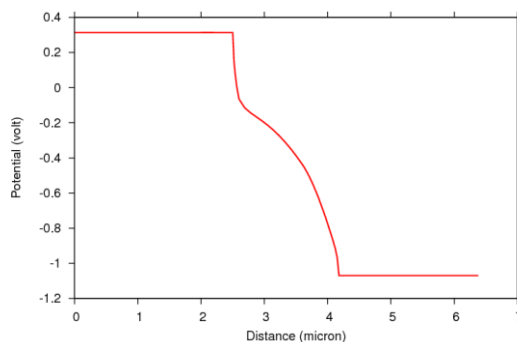
PICS3D 数据输出形式多种多样，不仅有自带的作图工具，也可以将数据导出为文本文件，供用户使用其它工具作图。

PICS3D 数据输出形式大致有以下几种：

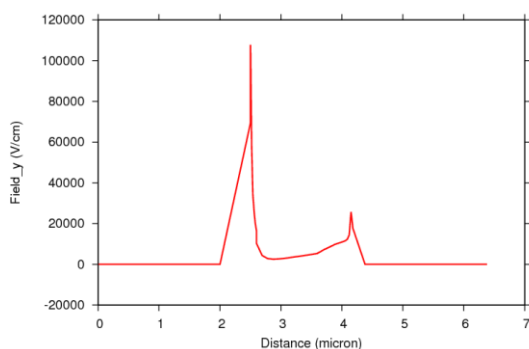
6.1 和位置相关的线性分布



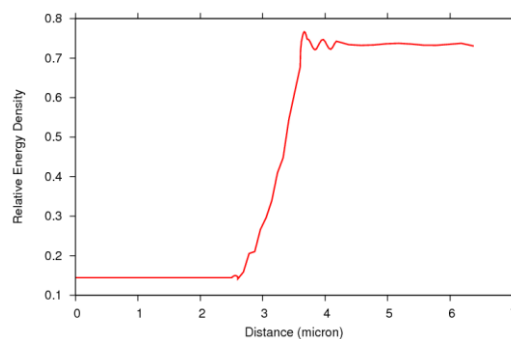
能带



电势



电场



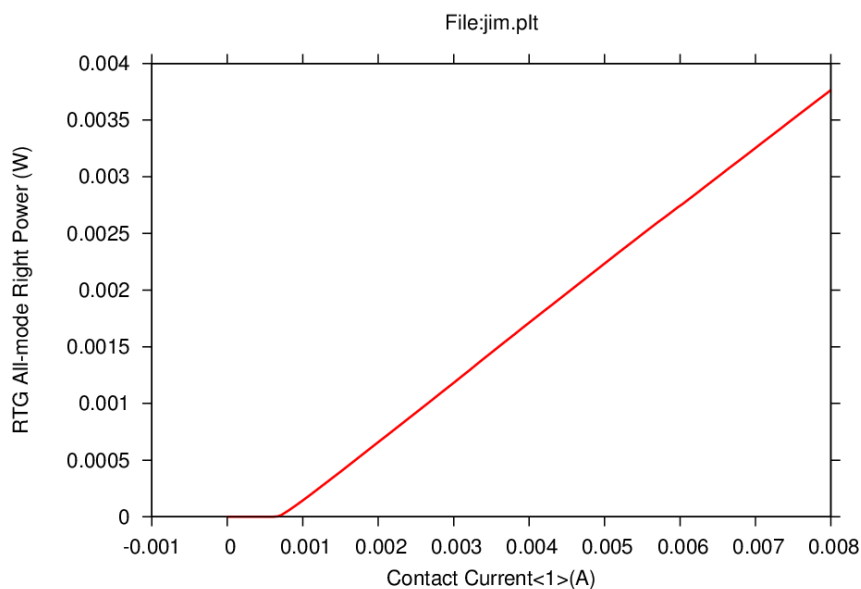
光强

能够处理的变量（纵坐标）有：

- ✓ 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

6.2 和 bias 相关的变量关系图

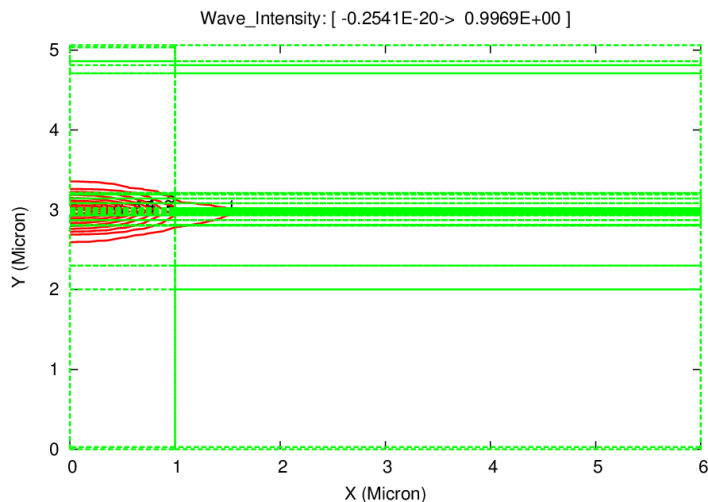


激光器光功率 (I-P 曲线)

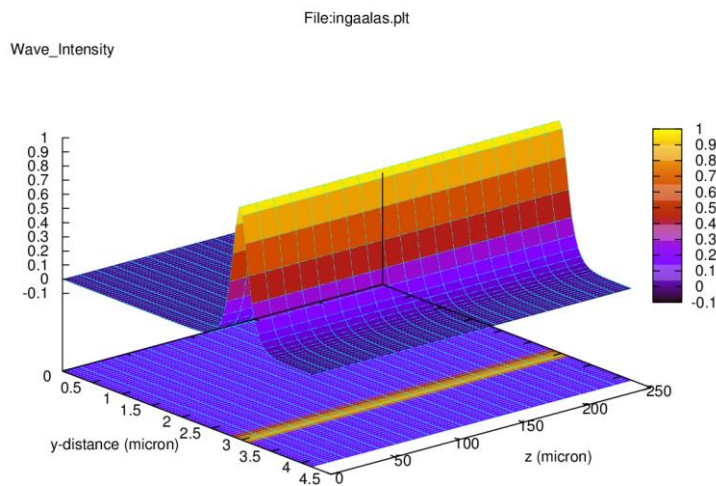
能够处理的变量 (横坐标或者纵坐标) 有 :

- ✓ 光强
- ✓ 电极电流
- ✓ 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
- ✓ 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

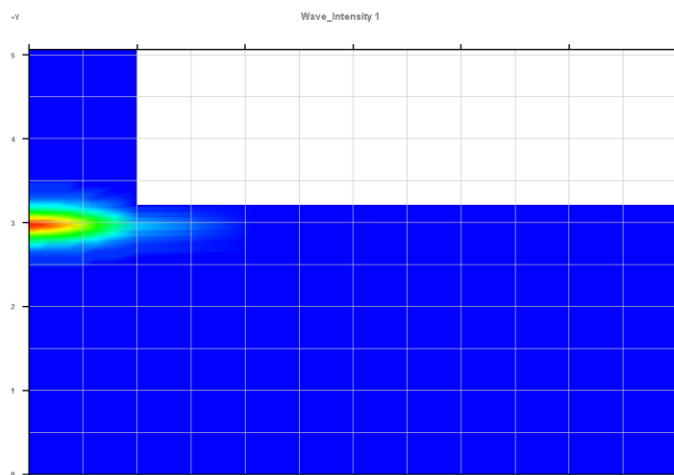
6.3 二维空间分布图



光场分布



光场分布

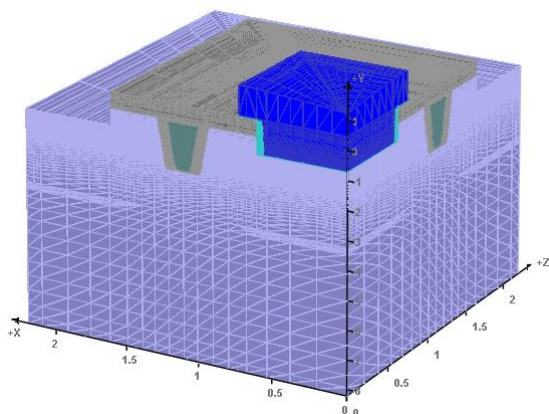


光场分布

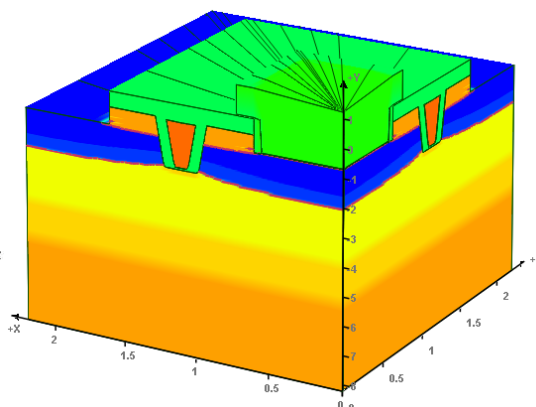
能够处理的变量有：

- ✓ 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

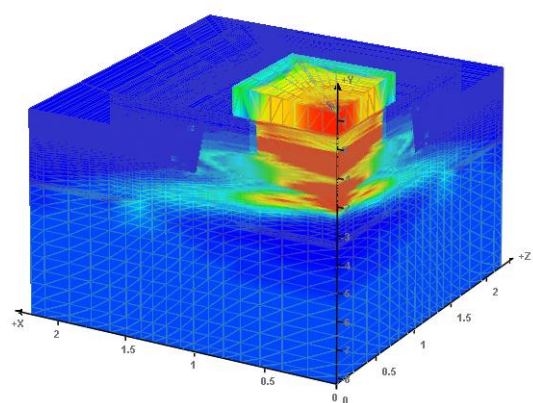
6.4 三维空间分布图



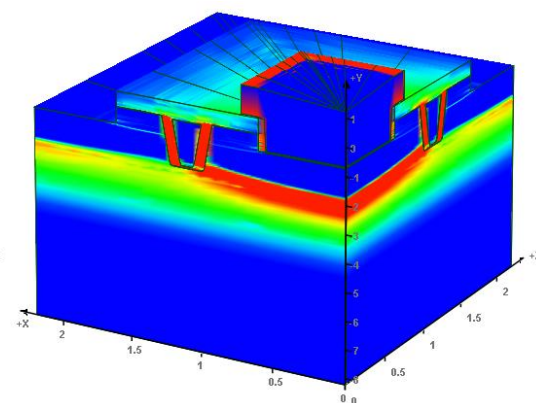
材料



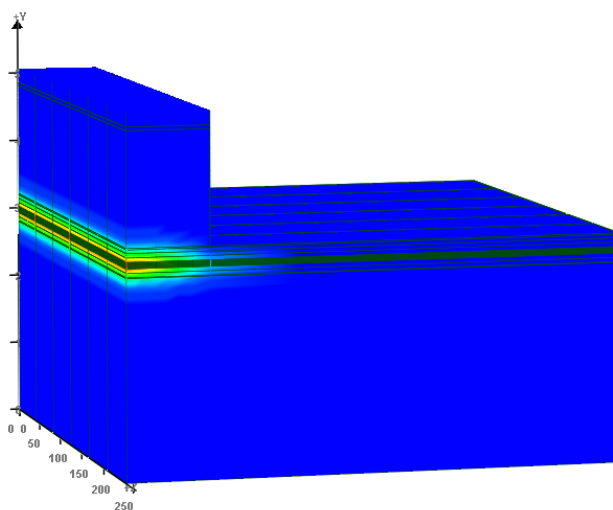
掺杂



电流



电场



光场

能够处理的变量有：

- ✓ 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 材料库

7.1 导体材料

钨(Tungsten) ITO ZnO Cu Ag AuGeNi Au Mo Be Mg Ca Sr Ba Nb Fe
Zn Cd Al Poly LiF_Al Ga In Tl Sn Pb Pd Ni Pt Bi Sb Ti NiSi

7.2 绝缘体材料

玻璃(Accu-Glass) SiO₂ TiO₂ 真空 空气 SiN 氧氮化物 光刻胶 AlAs 氧
化物 铁磷化铟 氧化铪 Al₂O₃ HfSiO₄ Ta₂O₅ Sapphire cfilter graphene
quartz

7.3 单质半导体材料

硅 多晶硅 无定形硅 Ge

7.4 二元化合物半导体材料

GaAs InP SiC 无定形锗硅 无定形碳化硅 锗硅 GaN AlN InN 六角形 SiC
GaSb InAs GaP SiN Ta₂O₅ Al₂O₃ 氧化铪 InSb CdS ZnO ZnTe ZnS

7.5 三元化合物半导体材料

InGaAs InGaP AlGaAs ZnCdSe InAlP AlGaAs InGaN AlGaN AlAsSb
GaPSb HgCdTe HfSiO₄ InGaSb GaAsSb InAlAs ITO(Indium Tin Oxide)

7.6 四元化合物半导体材料

铟镓锌氧化物 (IGZO) ZnMgSSe InGaAsP InGaAlP InGaAlAs
AlGaAsSb InGaAsN Cu(InGa)Se₂ LaCuOSe BeZnSeTe

7.7 五元化合物半导体材料

InGaAlPSb InGaAsNSb InGaNZnO

7.8 有机半导体材料

m-mtdata alpha-npd alq3 lif npb tpd bphen cbp

8 材料模型

Crosslight 的材料模型如下：

1) 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。

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, 并且影响无应力和有应力情况下的能带变化。在二类超晶格结构中, 此模型对准确计算器件增益和量子传输具有重要作用。

3) 三元及以上的化合物材料参数的插值模型。

4) 迁移率模型。依赖于电场强度, 掺杂浓度, 温度和 trap 等。

5) 用于计算击穿的碰撞离化模型。具有多种碰撞离化模型, 并拟合好常用的 III-IV 族材料的模型参数。

6) 量子阱和量子点模型。包含: 带间及自带间光跃迁模型, 自洽的载流子密度模型, 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。

7) 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) , 等等。

8) 软件包含了三种 SiC 材料材料宏定义 : 4H-SiC, 6H-SiC 和 s.i.SiC , 并有几个实例展示了 SiC 材料相关器件的仿真 , 例如包含多种 trap 的 SiC 等。SiC 材料属于宽禁带半导体 , 如有其它特殊的材料模型 , 软件可以另行增加。

9) III-V 族化合物的很多参数值的确认和修改参考了权威的 VMR-paper: "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys," I. Vurgaftman and J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. Vol. 89, No. 11, 1 June 2001, p. 5815

10)有机半导体材料模型。建立在大量文献数据之上 , 采用先进的参数模型 , 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。