

## PICS3D 软件基础包及可选模块

一个完整的 PICS3D 软件包含 基础软件包 和 若干可选模块

### 基础软件包:

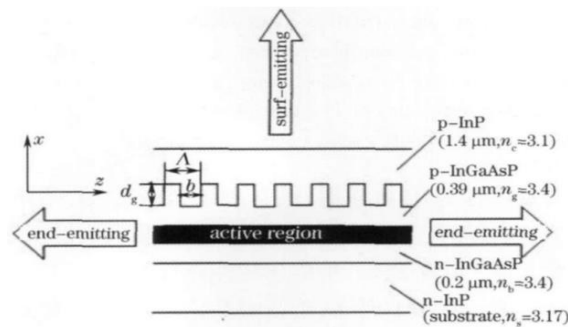
A. PICS3D Edge Laser - only Edition **边发射激光器和侧向光波导**

B. PICS3D VCSEL - only Edition **垂直腔面发射激光器**

### 可选模块:

#### 1. 2nd Order Grating 二阶光栅模型

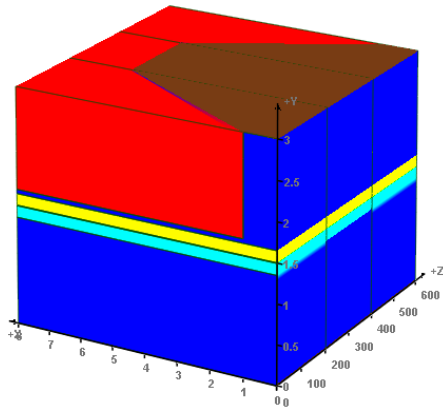
用于计算二阶光栅对光在水平方向和垂直方向上的衍射作用,具体可应用在具有二阶光栅的DFB结构中,计算激光器分别在水平和垂直方向的耦合系数和辐射功率。



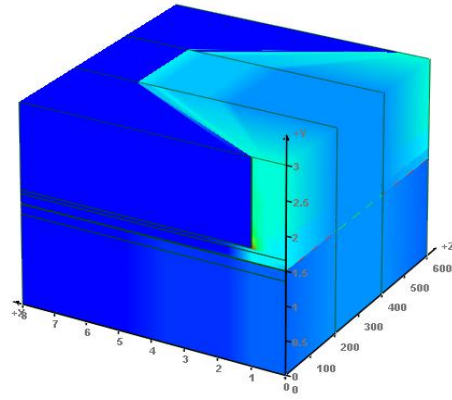
二阶光栅 DFB 激光器的结构图

#### 2. 3D Current Flow / Mesh Connectivity (基础软件包 A 自带, 仅 B 可选)

实现边发射激光器或者波导 3D 结构的构建,以及在腔长方向上的电流传输和光学纵模的耦合效应,给出电流及光场的 3D 分布。基础软件包 B+此选项,用于计算非旋转对称结构的 VCSEL,比如,长方体 VCSEL。



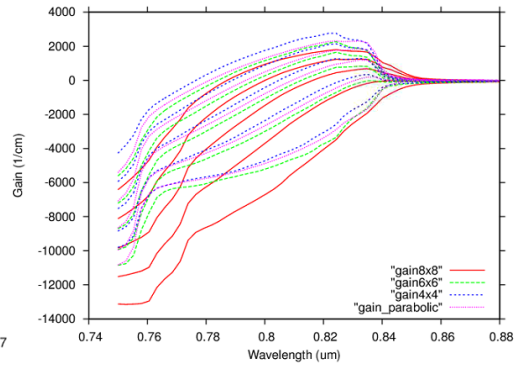
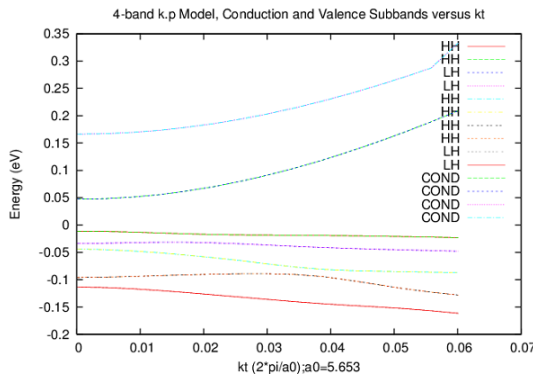
材料结构图



电流分布图

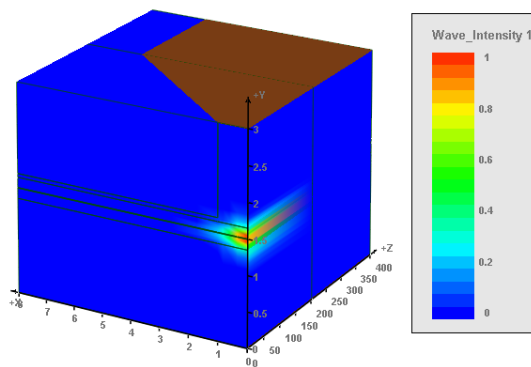
### 3. Advanced k·p model /Plane Orientations

通过包含导带和价带 (HH, LH, SO) 的  $8 \times 8$   $k \cdot p$  理论来计算能带, 一般使用在 wurtzite 材料如 GaN 基多量子阱结构。



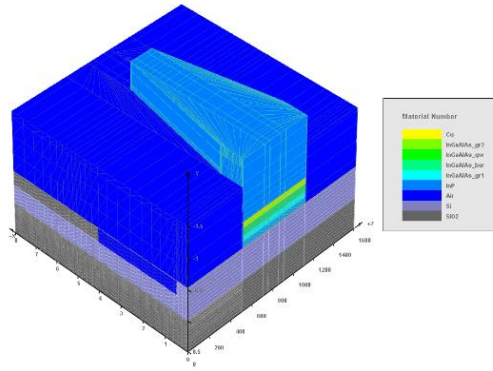
### 4. Beam Propagation Method

一般的光波导 (FP, DFB 等) 在纵向方向上没有大的横截面变化, 当光波导的横截面发生较大变化的时候, 其侧向模式也发生大的变化, 此时需要采用 **BPM 模型**。例如 tapered 结构的激光器及光波导。



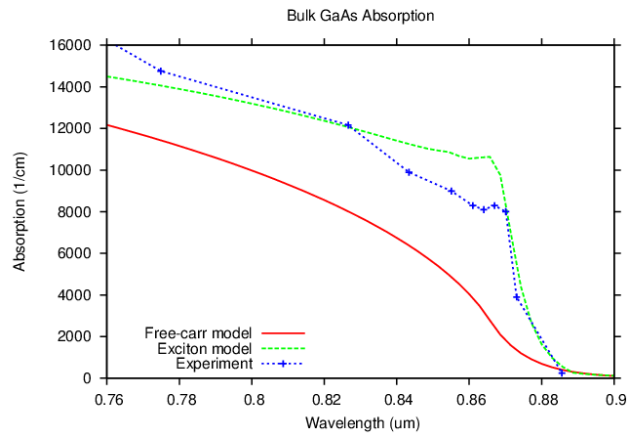
### 5. CSUPREM Builder / Mesh Interface

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。



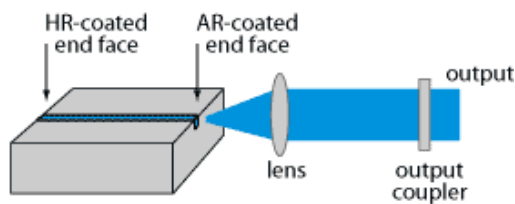
## 6. Exciton/Manybody Gain

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 ) 。



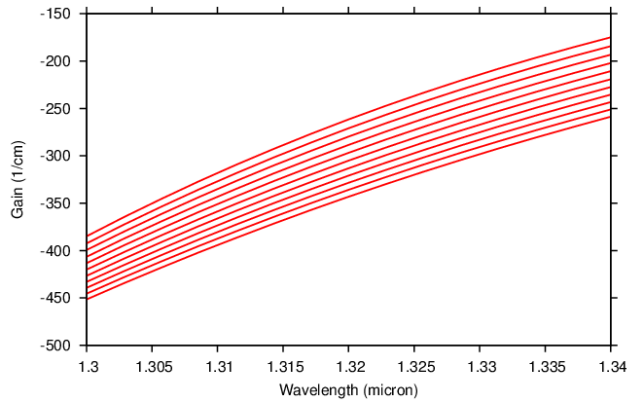
## 7. Fiber/External-Cavity

用于计算如下图所示的**外腔激光器**。注：VCSEL with external air cavity 不需要此模块。



## 8. Franz-Keldysh (Bulk modulator)

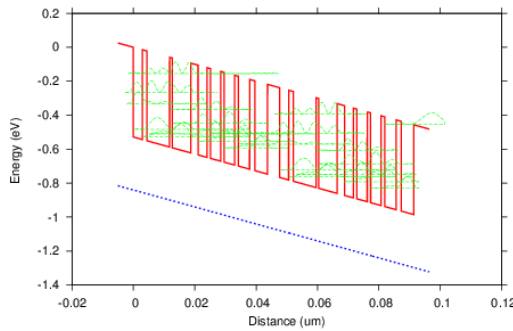
弗兰之-克尔德什效应 ( Franz-Keldysh effect ) 模型，加电场时，半导体的光吸收发生变化，在大块和均匀的半导体中出现，用作电吸收调节器。



电压不同导致材料吸收谱发生变化

### 9. Intersubband (QWIP/QCL)

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 )。

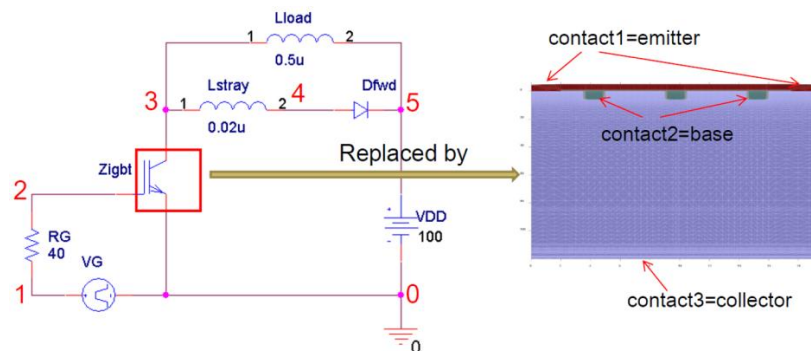


### 10. LASTIP Fabry-Perot Model

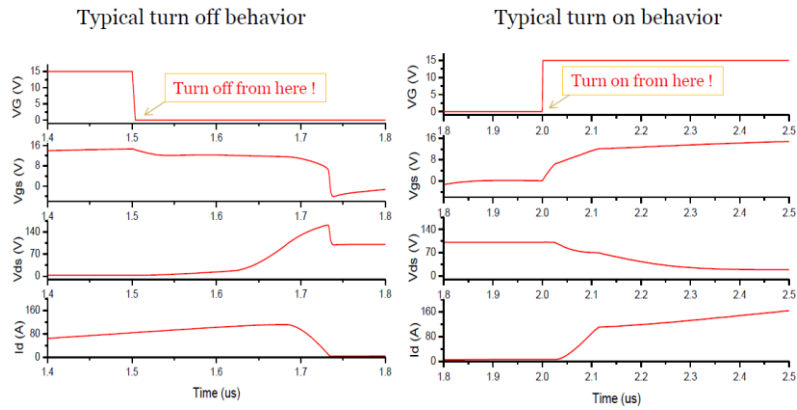
兼容原 LASTIP 软件模拟 2D 边发射激光器的所有功能及其附带的例子,适用于 2015 年及之前的 LASTIP 用户选择。

### 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。



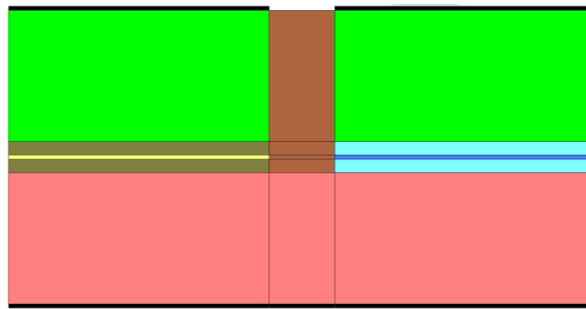
解析电路和数值器件结合



分析电路上各节点 ( node ) 上的电流电压

## 12. Multicity

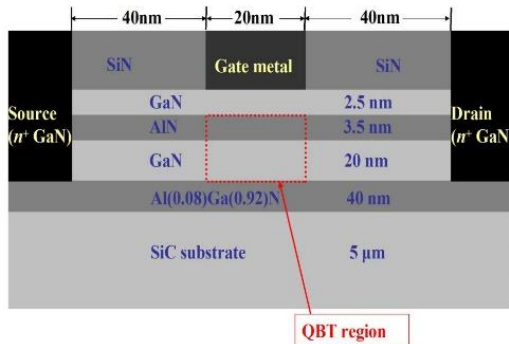
实现具有**相同或不同激光波长**的多个谐振腔的一维阵列模拟,既可实现**电注入的共享操作**也可以单独操作,同时也可以考虑**光学腔之间的耦合作用**。



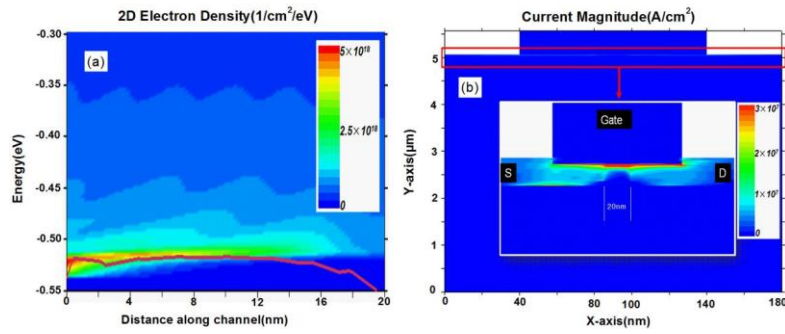
左右两个谐振腔具有不同的量子阱,即会激射不同波长的激光

## 13. NEGF (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**。



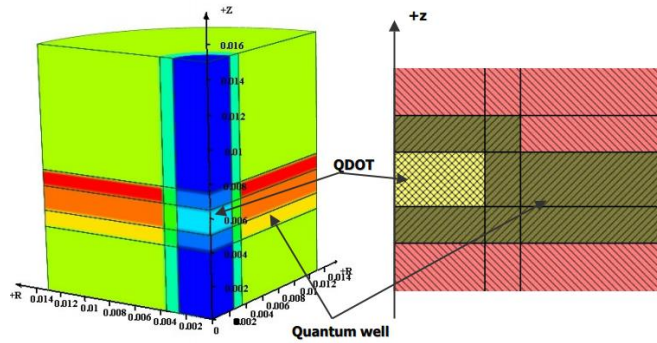
a)超短沟道双异质结 GaN 基 HEMT 结构示意图



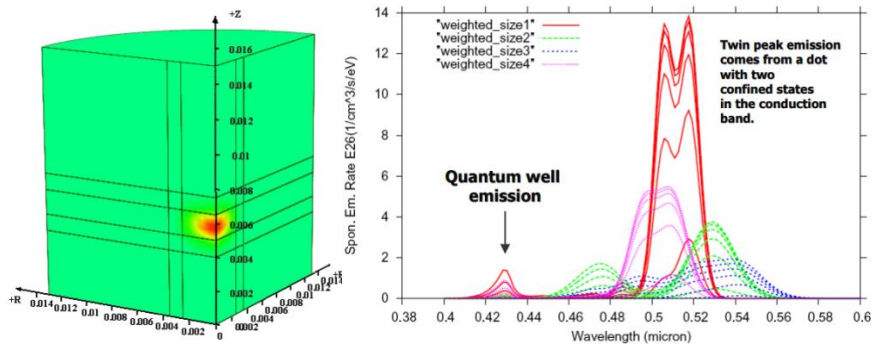
b)NEGF 方法计算的沿着沟道方向电子密度能量谱 c)整个器件内部电流密度分布。

## 14. Quantum Dots

主要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、跃迁及其对激光波长的影响。



a)埋在量子阱中的量子点

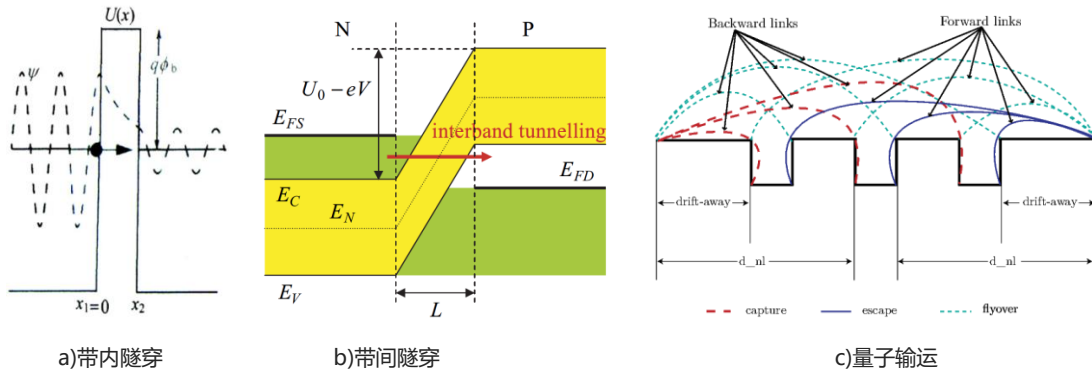


b)量子点发光

c)发光光谱 (体现量子点和量子阱的竞争)

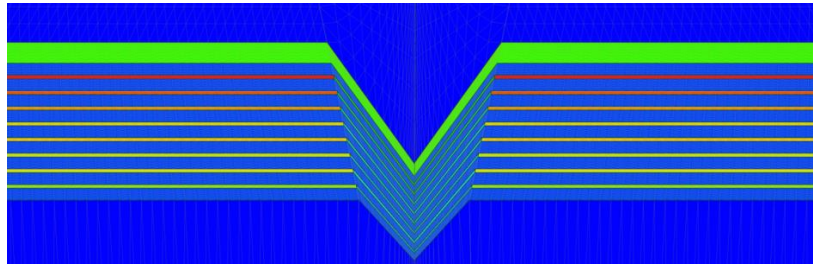
## 15. Quantum Tunneling/Transport

(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。



## 16. Rotated MQW

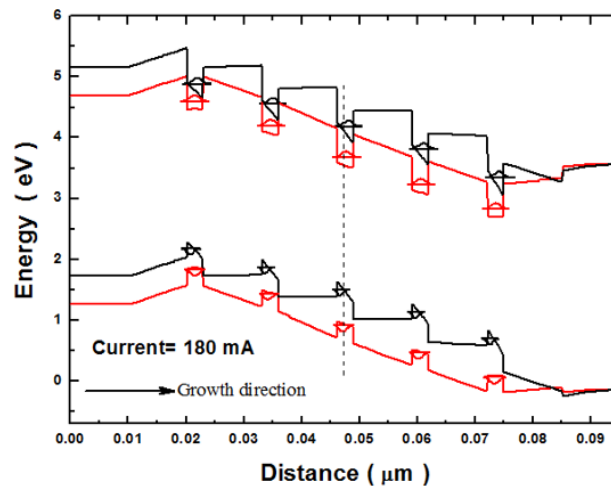
用于计算生长在**任意晶面**上的多量子阱结构中的载流子传输和复合过程，例如，InGaN 多量子阱发光二极管 V-shaped pits 中的多量子阱结构。



## 17. Self-consistent MQW/Piezo

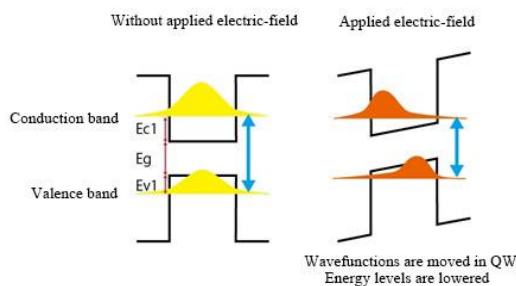
自洽的量子阱载流子浓度模型。在**外加电场**对量子区域的**电子空穴能级和态密度**等影响明显的情况下，此模块显得尤为重要。主要针对以下 3 种情况：

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。

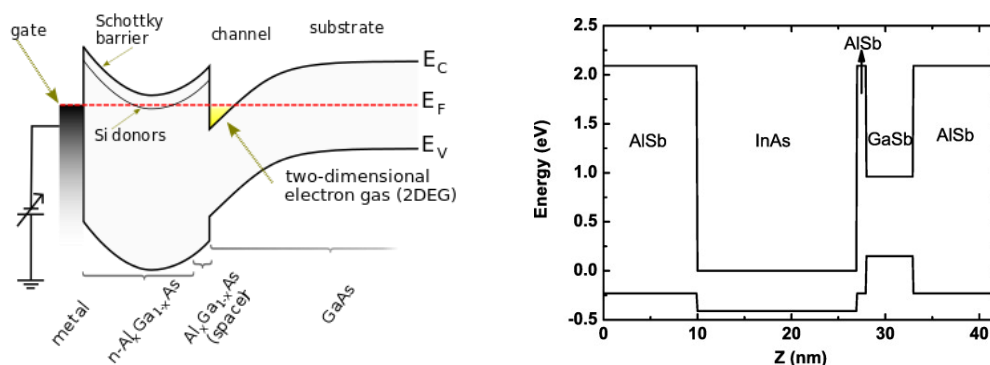


第二种情况针对 quantum confined stark effect(QCSE 量子限制斯塔克效应)，此时量子

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。

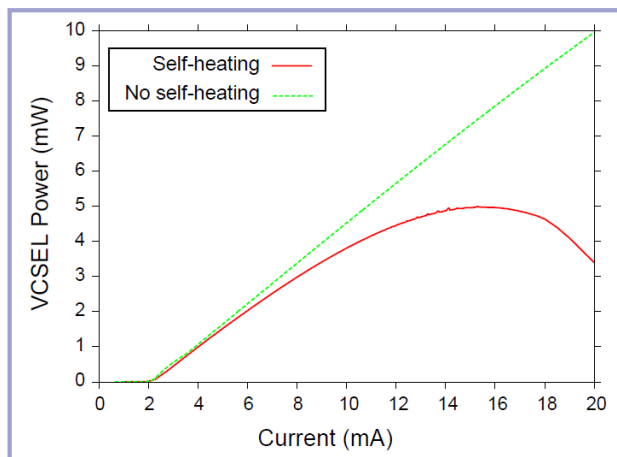


第三种情况针对普遍意义上的复杂量子结构，如非对称量子阱和超晶格结构等。



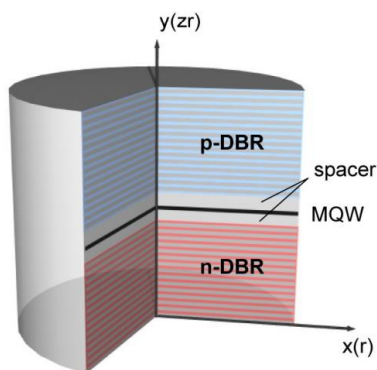
## 18. Thermal Option

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。



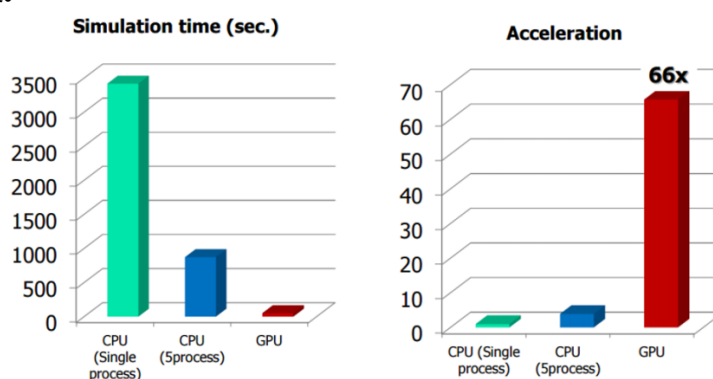
## 19. VCSEL model (基础软件包 B 自带, 仅 A 可选)

专门针对 VCSEL 的计算模型，采用有效折射率方法 (Effective index method) 和类光纤有效折射率方法 (Fiber-like effective index method) 来计算侧模。基础包软件 A+此选项，用于计算既具有旋转对称 (圆柱体) 又具有非旋转对称 (长方体) 结构的 VCSEL。



## 20. 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。

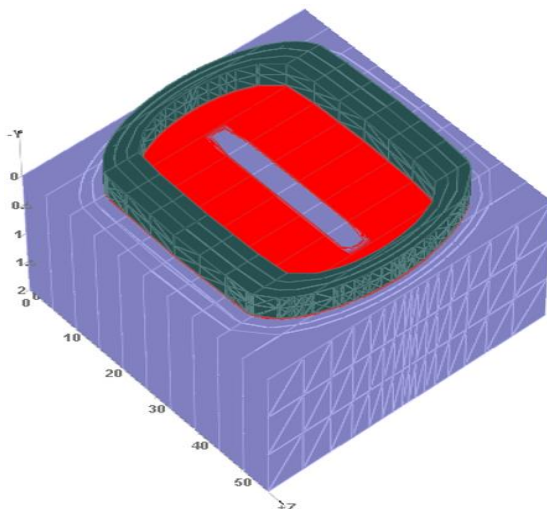


## 21. Type II MQW Transport

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。

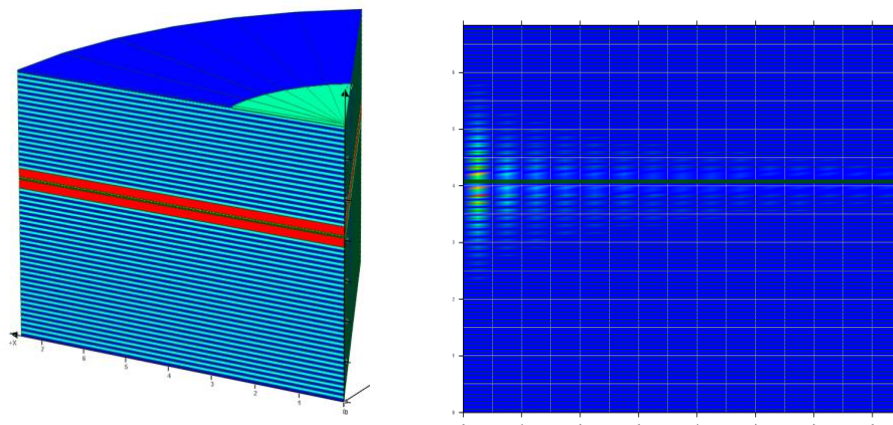
**22. 3D Bent Mesh** (必需 CSUPREM Builder / Mesh Interface 和 3D Current Flow / Mesh Connectivity 模块)

用于具有**弧面等弯面形状**的三维有限元网格的构建。



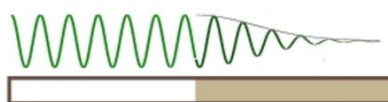
### 23. Micro-cavity laser model (必需 PML/EEIM (radiative/leaky modes)模块)

严格的麦克斯韦方程求解，不拆分侧向和纵向模式，能够精确计算具有任意侧向结构变化如 surface relieved VCSEL 的各阶侧模分布。

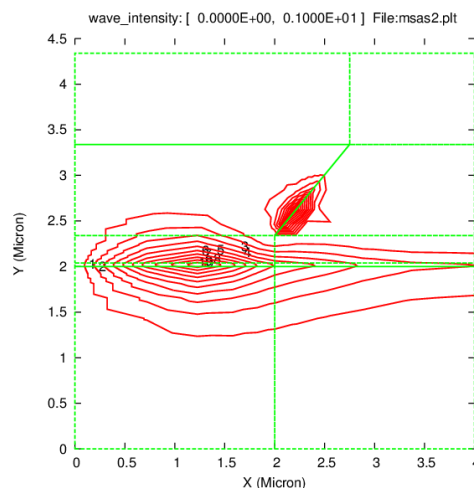


### 24. PML/EEIM (radiative/leaky modes)

PML 用于设置光波在边界处的完美匹配吸收层。



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。



由于辐射模的存在，使得器件边界需要设置 PML，两者的结合才可以处理器件侧模泄露的问题，因此归为一个模块。

### 25 SOA/Modulator

在 Pics3D 软件中，侧面入射光在波导中的光衰减(EAM)和光放大(SOA)被合并成一个模块。

在 EAM 中，使用 `waveguide_input` 命令定义侧向入射光，并激活此模块；

在 SOA 中，使用 `3d_amplifier_model` 命令定义侧向入射光，并激活此模块；

# PICS3D 软件**基础包**涵盖内容

## 基础软件包：

A. PICS3D Edge Laser - only Edition **边发射激光器和侧向光波导**

B. PICS3D VCSEL - only Edition **垂直腔面发射激光器**

类别	详细	基础包
一. 基本方程和自治	1.1 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 光波导模式方程，用于计算波导侧向模式；	A B
	1.3 自发射/受激辐射和光子速率方程，用于计算激光器受激辐射过程中的光模式增益、光子密度分布和光能量分布等；	A B
	1.4 纵向 ( longitudinal ) 传播光波方程，用于计算纵向光波模式和光波能量分布等；	A B
	1.5 电学和光学方程之间通过受载流子浓度影响的材料折射率变化等因素进行自治求解，实现物理过程的准确描述；	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 AC 分析模型，用于分析器件的交流小信号响应；	A B
	2.3 价带混合 ( Valance Mixing ) 量子阱 k.p 能带模型模型；	A B
	2.4 包含应力效应的量子阱 k.p 能带模型；	A B
	2.5 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；	A B
	2.6 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；	A B
	2.7 多种增益展宽模型；	A B
	2.8 表面态和表面效应模型；	A B
	2.9 Poole-Frenkel 绝缘体导电模型；	A B
	2.10 载流子之间和载流子-光子散射模型；	A B
	2.11 77K 低温仿真模型；	A B
	2.12 光的多模式分析模型；	A B
	2.13 具有电场依赖性的迁移率模型；	A B

	2.14 依赖于温度的材料参数模型；	A	B
	2.15 3D 结构和电流连接模块,实现边发射激光器或者波导 3D 结构的构建,以及在腔长方向上的电流传输和光学纵模的耦合效应,给出电流及光场的 3D 分布；	A	
	2.16 VCSEL 模型,专门针对 VCSEL 的计算模型,采用有效折射率方法 ( Effective index method ) 和类光纤有效折射率方法 ( Fiber-like effective index method ) 来计算侧模；		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 异质交界面上的能带偏移 ( 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 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 输出数据包含 ( 不限于 ) : <ul style="list-style-type: none"> <li>• 光功率电流特性 ( L-I )</li> <li>• 2D/3D 电势、电场和电流分布图</li> <li>• 2D/3D 电子和空穴分布图</li> <li>• 不同电压下的能带分布图</li> <li>• 带有载流子波函数的量子阱子能带结构</li> </ul>	A	B

- 2D/3D 深能级陷阱的布居和浓度分布
- 2D/3D 光强分布
- 2D/3D 局部光增益分布
- 完整的多模式辐射光谱
- 电流和激射波长、输出光功率以及纵向 ( longitudinal ) 光子密度分布之间的关系
- 不同偏压下的相对强度噪声(Relative Intensity Noise, RIN), 频率噪声(Frequency Noise, FM) 和光谱线宽(spectral line-width) ;

---

**7.4** 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**

---

**7.5** 能够自由绑定不同曲线于一张图中; **A B**

---

**八 . 能处理的器件** **8.1** 基本的 Fabry-Perot (FP)激光器计算; **A B**

---

**类型**

**8.2** 基本的 Distributed Feedback (DFB)激光器计算, 包含相移 (phase-shift)DFB 激光器。光栅的设置有以下几种方式:

- 直接设置 kappa 值
  - 设置光栅周期内各层材料的厚度和折射率值以及光栅的深度, 自动计算 kappa 值
  - 设置光栅周期内各层材料的厚度、材料名字和光栅的深度, 自动根据材料的参数定义计算不同注入条件和温度下的折射率, 最终得到 kappa 值
  - 调用光栅周期内的折射率剖面文件和光栅的深度, 自动计算 kappa 值;
- 

**九 . 帮助文档** **9.1** Pics3D 软件英文手册; **A B**

---

**9.2** 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**

---

**十 . 其它功能** **10.1** 多种稀疏矩阵求解器的切换功能; **A B**

---

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

---

**10.3** 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**

---

**10.4** 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**

---