

一. 数据输出和作图引用

1).plt 文件里的 “xy_data” 和 “scan_data” 是什么意思？

“xy_data” 用于调用与器件结构或位置相关的输出数据文件编号；“scan_data” 用于调用与扫描变量相关的输出数据文件编号。

“xy_data” 和 “scan_data” 指定所需数据文件编号后，在.plt 文件中通过脚本命令，如 plot_1d 和 plot_scan 等，做出相应的图形。

对应于 “xy_data”，CrosslightView 界面默认将结构相关物理量显示在右边条状列表框中，可根据需要选择输出相应的物理量在结构中的分布，比如，迁移率、载流子浓度、电场、势、电流分布等。如果在 CrosslightView 要输出 “scan_data” 相关参数，可选择 Crosslightview 界面中 “View” 按钮下面的 “Scan Bias Data”，与扫描变量相关的数据对话框会显示出来，选择.std 文件并导入其中数据，在 “Set Vertical Axis” 选择纵坐标变量，在 “Set Horizontal Axis” 选择横坐标变量，然后点击 “OK” 就可以画出随扫描变量变化的物理量的结果图，比如，I-V、I-P、电流随光照、电流或电压随时间等的变化关系图。

2) 什么是扫描行 (scanline) 编号和数据点 (dataset) 编号以及他们之间有什么的关系。？

软件中既有扫描行编号 `scanline` 也有数据点编号 `dataset`。

在.sol 文件中的“equilibrium”命令行默认为第 1 个扫描行，它仅仅产生第 1 个数据点 `dataset(1,1)`，因为模拟通常开始于“equilibrium”命令行。

在.plt 文件的 `xy_data=(n1,n2)` 或 `scan_data=(n1,n2)`中，n1 表示开始的数据点编号，n2 表示结束的数据点编号。

对仅仅输出一个数据点的扫描行，则 $n1=n2$ 。

“equilibrium”命令会将所有的扫描变量（如电压，电流，光强，时间等）初始化为 0。

软件会将第一个“equilibrium”命令后面的每一个“scan”命令行和“equilibrium”命令行自动编号为第 2，第 3，第 4，...个扫描行。

每一个“scan”命令会产生一个或多个数据点。

需要注意的是，在“scan”命令中，被扫描变量的初始值为上一个扫描行的计算结束时的最终值并且其中的“print_step”决定了这个扫描行可以产生多少个数据点。请参考如下例子（以\$符号开始的行是注释行；&&符号为续行符）：

```
$ scanline=1 默认
equilibrium
$此scanline只产生一个数据点文件 dataset(1,1)
$此处为平衡态状态，所有被扫描变量都初始化为0.

newton_par damping_step=3. print_flag=3 &&
change_variable=no var_tol=1.e-1 res_tol=1.e-4
$此命令为牛顿迭代相关参数设置，和
$ 扫描行编号(scanline)及数据点编号(dataset)没有关系
```

```
$ scanline=2 按顺序编号
scan var=voltage_3 value_to=1. print_step=0.5 &&
init_step=0.01 min_step=1.e-5 max_step=0.1
$此scanline会产生2个数据点文件 dataset(2,3)，因为变量voltage_3从0被扫描到
$ value_to=1，而数据输出间隔print_step=0.5，因此在value=0.5和value=1两次输
$ 出数据文件。
```

```
$ scanline=3 按顺序编号
scan var=voltage_2 value_to=-0.5 print_step=5. &&
init_step=0.01 min_step=1.e-5 max_step=0.2
$此scanline会产生1个数据点文件dataset(4,4)，因为变量voltage_2在上一个
$ scanline结束后的值为0，在此scanline中将被扫描到value_to=-0.5，而数据输
$ 出间隔print_step=5.0，大于 |-0.5-0|，因此只能在value=-0.5处输出数据文件。
```

```
$ scanline=4 按顺序编号
scan var=voltage_2 value_to=1. print_step=0.1 &&
init_step=0.01 min_step=1.e-5 max_step=0.06
$此 scanline 会输出 15 个数据点文件 data_set(5,19)，因为变量 voltage_2
$ 在上一个 scanline 结束后的值为-0.5，在此 scanline 中
$ 将被扫描到 value_to=1，而数据输出间隔 print_step=0.1，
$ 因此在 value=-0.4,-0.3,-0.2,.....,1.0 处输出 15 个数据文件。
```

执行上述命令后，这些不同的扫描行一共可以产生 $1+2+1+15=19$ 个数据点。在项目文件（显示在 simuApsys/simuLastip/simuPics3D 的 output 窗口）中可以看到相应的数据点数据。文件`***.sol.msg` 包含了数据点的详细信息和对应的电压和电流值。

我们也可以采用比较大的“print_step”值（大于扫描变量的最终值与初始值之差的绝对值）来只产生一个数据点，这样会使扫描行编号与数据点编号一一对应。我们只需要注意 sol 文件中的扫描行编号就可以了。

3) 怎样利用.sol 文件产生的扫描行和数据点在.plt 中画出类似于 I-V

的扫描曲线?

需要提前说明的是，虽然一些扫描变量例如光、时间和波长等与电极编号没有关系，但 I-V 曲线与电极编号却是有关系的，因为电极上的电压和电流有正负值。

在作图的时候，数据点调用通过设置 `xy_data` 和 `scan_data` 实现，扫描行调用通过设置 `scanline` 实现。

`scanline` 调用的对应数据点范围会覆盖取代 `xy_data` 和 `scan_data` 指定的数据点范围。

`.plt` 中的多个作图命令可以合并在一张图中。

作图命令产生的曲线可以另存为数据文件，以供其它作图软件使用。

我们使用下面例子展示上述作图功能（以\$符号开始的行是注释行；&&符号为续行符）：

```
get_data main_input=apd01ph.sol &&  
sol_inf=apd01ph.out &&  
xy_data=[4 6] scan_data=[4 6]
```

\$此命令的`xy_data`和`scan_data`参数设置了数据点编号的起末点，
\$ 用于限制下面作图命令调用数据点编号的范围。

```
plot_scan scan_var=voltage_1 variable=current_2 &&  
scale_2=log scanline=4 merge_next=yes
```

\$1. 此命令用来画出I-V曲线。

\$2. `scanline=4`用来指定I-V曲线调用的数据点范围，此范围将取代

\$ 前面`get_data`中`scan_data`所指定的数据点范围。

\$3. `scan_var=voltage_1` 和 `variable=current_2`表示I-V曲线的横坐标

\$ 为编号为1的电极上的电压，纵坐标为编号为2的电极上的电流。

\$4. `scale_2=log`表示纵坐标的值为初始值的log值。

\$5. `merge_next=yes`表示此I-V曲线将和下一个

\$ `plot_scan`所产生的I-V曲线进行合并显示。

```
plot_scan scan_var=voltage_1 variable=current_2 &&
```

```
scale_2=log scanline=6 merge_next=no
```

\$1. 此命令同样用来画出I-V曲线。

\$2. scanline=6用来指定不同的scanline对应的数据点范围。

\$3. merge_next=no表示此I-V曲线不和下一个作图命令产生的图形合并。

```
plot_scan scan_var=voltage_1 variable=current_2 &&
```

```
scale_2=linear scanline=4 merge_next=yes &&
```

```
data_file=IV_dark.dat
```

\$1. 此命令同样用来画出I-V曲线。

\$2. scale_2=linear表示纵坐标的值为原始值。

\$3. data_file=IV_dark.dat表示此I-V曲线的数据被另存在文件中。

```
plot_scan scan_var=voltage_1 variable=current_2 &&
```

```
scale_2=linear scanline=6 merge_next=no &&
```

```
data_file=IV_photo.dat
```

\$1. 此命令同样用来画出I-V曲线。

\$2. scale_2=linear表示纵坐标的值为原始值。

\$3. data_file=IV_photo.dat表示此I-V曲线的数据被另存在文件中。

\$4. 同时，此命令产生的I-V曲线和上一个I-V曲线合并显示。

在.plt文件中，如果使用 scanline 调用文件，必须使用与 sol 文件的“scan”命令中一致的变量名称。

上述为.plt中的作图命令的基本功能，更多功能使用者可以通过相关命令的详细帮助文档进一步挖掘。

4) Output 文件以编号的形式保存下来如 my.ou_0005，我怎么知道它们分别保存的是哪种偏置条件？

请在 my.sol.msg 或者 my.log 文件中查看。

二. 关于 α -Si 陷阱模型 的设置

5) 设置 α -Si:H 带尾态和深能级悬挂键态的模型是什么?

A) 针对导带和价带带边尾态的指数衰减模型

$$DOS(E) = \frac{N_{trap}}{E_{tail}} \exp\left[-\frac{(E-E_0)}{E_{tail}}\right] = DOS_{max} \exp\left[-\frac{(E-E_0)}{E_{tail}}\right]$$

其中, E_0 为特性能级, 用来表示导带或价带带边随带尾是否存在而发生的变化, 并假定 E 大于 E_0 , $DOS_{max} = N_{trap}/E_{tail}$ 。在材料库文件或 sol 文件中表示如下:

trap_conc_i (i trap number, integer) value= N_{trap} in m^{-3}
traplevel_tail_i (i trap number, integer) value= E_{tail} in eV

B) 针对带隙中悬挂键的高斯分布模型

$$DOS(E) = \frac{N_{trap}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}\right] = DOS_{max} \exp\left[-\frac{(E-E_0)^2}{2\sigma^2}\right]$$

其中 E_0 为表示高斯分布中心的特性能级, 导带带边为 E_0 的参考能级, 也就是说, E_0 是以导带带边能量为起点而测得的能量。

$$DOS_{max} = \frac{N_{trap}}{\sqrt{2\pi}\sigma}$$

在材料库文件或 sol 文件中表示如下:

trap_conc_i (i trap labeling number) value= N_{trap} in m^{-3}
trap_level_i (i trap labeling number) value= E_0 in eV
traplevel_stddev_i (i trap labeling number) value= σ in eV

6) 如何使用上述模型设置 α -Si:H 陷阱

如果用户有实验结果或来自其他方面的数据资料, 可以通过拟合上述模型来得到相关的参数, 再在材料库文件或 sol 文件中进行设置。

另一种方法, 用户可以通过简单估值 (准确性低) 方法来获得相应参

数，而不需要做过多的拟合工作。

a) 对于指数衰减模型，由于

$$\ln[DOS(E)] - \ln DOS_{\max} = -\frac{(E - E_0)}{E_{\text{tail}}}$$

方程的斜率 $-1/E_{\text{tail}}$ 及它在纵轴上的截距 $\ln DOS_{\max}$ ，那么从这两个参数，我们可以估算材料库或 sol 文件所需要的 E_{tail} 和 N_{trap} 参数。

b) 对于高斯分布模型，我们可以通过如下分布关系来估算半平均宽度 w_{half} 或衰减宽度 $w_{10\text{th}}$ ，

$$\sigma = w_{\text{half}} / [2\sqrt{\ln 4}] = 0.42466 w_{\text{half}} = w_{10\text{th}} / [2\sqrt{\ln 100}] = 0.23300 w_{10\text{th}}$$

然后估算 E_0 和 DOS_{\max} 及 N_{trap} ，通过这种方法获得高斯分布所需要的三个参数，然后再输入到材料库和 sol 文件中。

用户也可以固定某些参数值来构建自己的分布。例如，如果固定 DOS_{\max} 的数值，指数衰减模型就仅与一个参数 E_{tail} 相关，而高斯分布模型就只和两个参数 E_0 和 σ 相关。当然，也可以固定其他的参数，当所有参数都固定后，分布模型就构建完成了。

三. GaN/Si 应力问题

7) “lattice constant” 和 “lattice spacing” 如何设置?

“lattice constant” 是材料在没有应变下的晶格间距，“lattice spacing” 是实际的应变情况下的 LED 材料的晶格间距。

8) Crosslight 材料库中是如何计算应变的?

在 Crosslight 材料库中, 根据所设置的衬底晶格常数并假定 LED 结构中所有材料层的晶格间距 (lattice spacing) 相同并与衬底晶格常数 (lattice constant) 一致, 以此来计算每个量子阱层中所受的张应力和压应力。

9) 如果使用 InGaN/GaN/Sapphire 结构, 并且蓝宝石衬底 (Sapphire) 的晶格间距 (lattice spacing) 与 GaN 晶格常数 (lattice constant) 弛豫, 那会怎样?

衬底晶格间距与 GaN 的晶格常数弛豫, 由于衬底非常厚, 我们假定衬底完全弛豫无应力存在。也就是说, GaN 与衬底的晶格间距和常数相等。然而, 由于 InGaN 的晶格常数大于衬底的晶格间距, InGaN 多量子阱中存在压应力。

10) 如果使用 AlGaN/Silicon 或 GaN/Silicon, 并且衬底 (硅) 的晶格间距不与 AlGaN 或 GaN 晶格常数弛豫, 那会怎样?

在这种情况下, 如果硅衬底的弯曲在 GaN 或 AlGaN 缓冲层/衬底中引起很高的张应力 (增加 17%), 可以根据应力的大小 (GPa) 来估算出衬底的晶格间距。一个简单的计算可以将衬底中的应力 (GPa) 转换成应变, 这样, 用户就可以计算出衬底晶格间距。由于我们现存的模型假定整个 LED 晶格间距与衬底晶格常数相等, 用户只需要将衬底的晶格常数设置为张应力下的衬底晶格间距。

上述内容说明了如何使用 Crosslight 的传统应变模型。就应力模型而言，衬底间距是根据衬底弯曲张应力自动计算出来的，所以应力模型使用起来更方便。

11) Crosslight APSYS 如何处理缺陷和位错?

对于缺陷和位错，APSYS 没有相应的动力学模型，仅仅把它们当作 SRH 非辐射复合中心处理。然而，如果用户希望考察力学弯曲和缺陷传播行为，Crosslight 有另外一款软件叫 CSuprem，可以处理这种问题。APSYS 主要关注电学和光学的计算。

四. 其他不同种类问题

12) 假如金属/半导体界面接触电阻的单位为 $\text{Ohm}\cdot\text{m}^2$, 怎么把它引入到模拟中?

最好的方法是使用金属材料库，并通过在体材料的电阻值中加入 $\text{rho_contact}/\text{thickness}$ 项来引入接触电阻。 rho_contact 为接触电阻， thickness 为金属层厚度。要注意的是必须保证金属功函数与半导体带边保持一致，以免产生肖特基接触效应。

13) 怎样将与材料浓度相关的电阻引入到计算中?

如果电阻是由材料杂质浓度引起的，如书 (Physics of

Semiconductor Devices, 2nd edition, S. M. Sze, John Wiley & Sons) 中第32页图21所示, 这个效应可以通过设置与浓度相关的材料库来模拟。杂质浓度影响的最重要的材料参数是少数载流子寿命和迁移率等。对于太阳能电池, 少数载流子寿命的轻微改动就会影响短路电流密度。

14) 如何从 AC (交流小信号) 分析中得到 C-V (电容 - 电压) 曲线?

在 Crosslight 器件模拟软件中, AC 分析通常是在每个数据点上画出频谱图。下面说明如何从 AC 分析中画出 C-V 曲线:

在 sol 文件中,

a) 在`***.sol` (例如, `pn.sol`) 中设置 “`more_output ac_data=yes`”, 打印并保存多个数据点。请确保相应的扫描行中的参数 “`print_step`” 足够小以至于能够产生一定数量的数据点。(请参见本文中的 “数据输出格式” 部分)。

在 plt 文件中,

b) 引用某个扫描行产生的多个数据点。注意: “Equilibrium” 扫描行 (产生第 1 个数据点) 不包含 AC 信息, 这里不要采用这个数据点。例子如下: (表示第 2 个扫描行扫描电压并产生了第 2 到第 16 共 15 个数据点)

```
get_data main_input=pn.sol sol_inf=pn.out &&  
xy_data=[2 16] scan_data=(2 16)
```

c) 用命令 “`ac_voltage`” 中的参数 “`log_freq1=*.*`” 和 “`log_freq2=*.*`” 来设置 AC 频率 (6 表示 $10.e6=1\text{MHz}$);

- d) 设置命令 “ac_voltage” 中的参数 “versus_bias=yes” ；
- e) 设置命令 “ set_xydata_for_scan ” 中的参数 “scan_var=voltage_1” ；
- f)设置命令 “plot_ac_curr”中的参数 “variable=capacitance_1”。

设置完成后，在 plt 文件中我们可以根据下述命令输出 C-V 曲线。

```
get_data main_input=pn.sol sol_inf=pn.out &&  
xy_data=[2 16] scan_data=(2 16)
```

```
ac_voltage log_freq1=6. log_freq2=6. contact_num=1 &&  
freq_point=2 versus_bias=yes scanline=2  
set_xydata_for_scan scan_var=voltage_1
```

```
plot_ac_curr variable=capacitance_1
```