

器件仿真基础学习 step02 仿真项目框架

本段内容的目的是让初学者了解到一个完整的器件仿真项目所包含的基本内容。

第 1 部分介绍了仿真项目的整体框架；

第 2 部分介绍了构建器件结构 (结构建模) 的三种程序，了解到在实际仿真中，针对不同复杂程度的器件几何结构需要使用不同的结构建模程序；

第 3 部分介绍了计算方案的基本内容，这是仿真项目的中轴所在；

第 4 部分介绍了查看计算结果的两种途径并分析了两种途径的优缺点。

目录

1 整体框架	2
2 器件结构的构建	3
2.1 构建结构方法 1: Layerbuilder/Layer3d.....	3
2.2 构建结构方法 2 : GeoEditor/GeoEditor3d	6
2.3 构建结构方法 3: Csuprem 软件.....	9
3 计算方案	11
3.1 调用器件结构	11
3.2 调用物理数学模型	11
3.3 器件工作条件设定	12
4 结果查看分析和数据导出	13
4.1 通过.plt 查看结果.....	13
4.2 通过 CrosslightView 查看结果	15
4.3 .plt 脚本和 CrosslightView 两者的优缺点	16

1 整体框架

一个完整的器件仿真应当包含器件结构的构建,计算方案的设定以及计算结果的查看分析:



首先是构建器件的二维或者三维结构;

接着在计算方案中调用器件结构,并设定物理数学模型以及外置条件(偏压,注入电流,入射光照等);

设定好计算方案后进行仿真计算;

最后,计算过程中保存的结果被后处理程序调用,用来产生用户需要查看,分析和导出的图形以及数据。

2 器件结构的构建

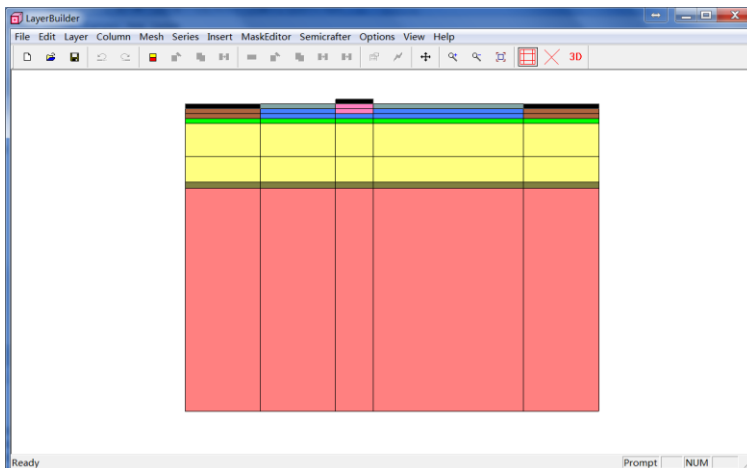
Crosslight 软件提供了三个构建结构的方法：

- Layerbuilder/layer3d 构建的 2D/3D 结构由长方形和梯形单元拼接而成，建模速度快，适用于简单的薄膜外延结构，如大部分激光器件；
- GeoEditor/GeoEditor3D 构建的 2D/3D 结构由三角形，长方形，任意四边形以及弧形拼接而成，适用于任意复杂的几何结构，如 LED 电极设计，但是要完成一个复杂图形的拼接难度较高；
- Csuprem 构建的 2D/3D 结构直接从微电子工艺仿真中的沉积和刻蚀工艺得到，同时结合导入 mask 掩膜版的功能，具有优秀的 2D/3D 网格生成能力，其自动生成复杂图形网格的能力使其适用于目前大部分复杂的微电子和光电子器件的几何结构建模。

三个构建结构的方法各有优缺点，用户可以根据所设计的器件复杂程度自行选择，下面一一介绍这三个方法。

2.1 构建结构方法 1：Layerbuilder/Layer3d

通过 Layerbuilder 图形界面程序搭建结构：



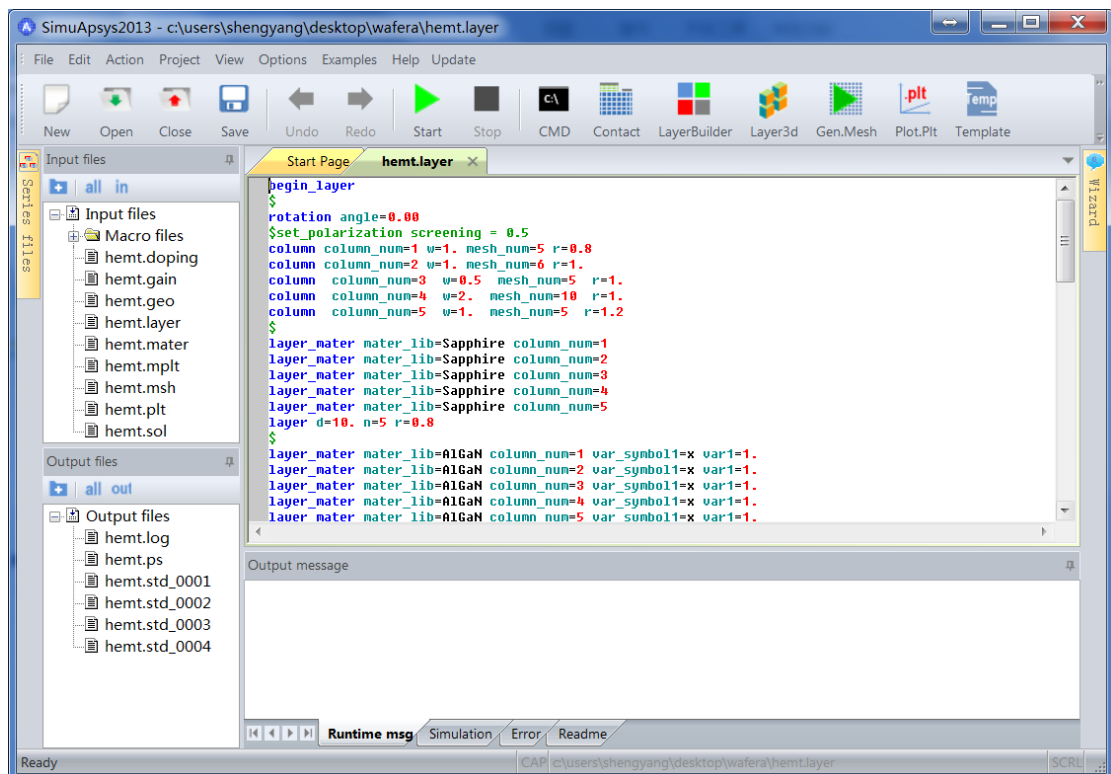
Layerbuilder 界面编辑的结构被保存为.layer 文件：

hemt.layer

.layer 文件实际上是文本文件，里面包含了许多“脚本命令”，如下图所示：

```
begin_layer
$
rotation angle=0.00
$set_polarization screening = 0.5
column column_num=1 w=1. mesh_num=5 r=0.8
column column_num=2 w=1. mesh_num=6 r=1.
column column_num=3 w=0.5 mesh_num=5 r=1.
column column_num=4 w=2. mesh_num=10 r=1.
column column_num=5 w=1. mesh_num=5 r=1.2
$
layer_mater mater_lib=Sapphire column_num=1
layer_mater mater_lib=Sapphire column_num=2
layer_mater mater_lib=Sapphire column_num=3
layer_mater mater_lib=Sapphire column_num=4
layer_mater mater_lib=Sapphire column_num=5
layer d=10. n=5 r=0.8
$
layer_mater mater_lib=AlGaIn column_num=1 var_symbol1=x var1=1.
layer_mater mater_lib=AlGaIn column_num=2 var_symbol1=x var1=1.
layer_mater mater_lib=AlGaIn column_num=3 var_symbol1=x var1=1.
layer_mater mater_lib=AlGaIn column_num=4 var_symbol1=x var1=1.
layer_mater mater_lib=AlGaIn column_num=5 var_symbol1=x var1=1.
layer d=0.25 n=4 r=1.
```

可以在项目管理中心(以下简称 Simucenter，是 SimuApsys，SimuLastip 和 SimuPics3D 的统称)中直接编辑：

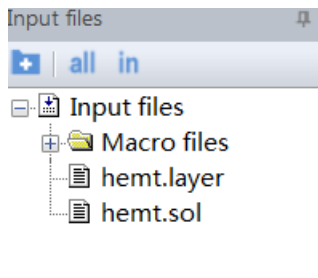


.layer 文件里面包含的那些“脚本命令”完整地定义了器件的几何结构，掺杂浓度，材料，网格划分以及电极等信息。

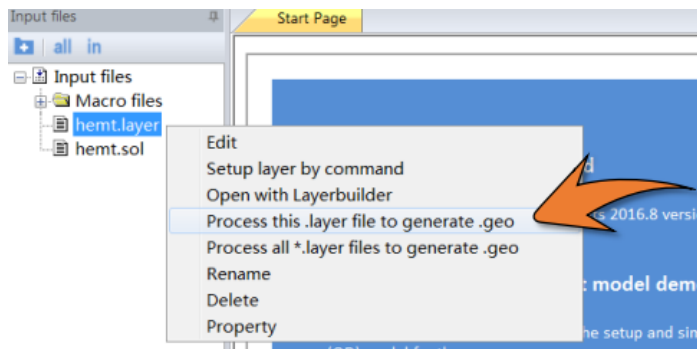
需要特别说明的是，.layer 文件能够方便快捷地构建多层外延薄膜结构（类似于搭积木），而考虑到构建复杂的异形结构的需求，Crosslight 设计了如下方案：

将.layer 拆分成.geo, .doping 和 .mater 文件,这些文件使用 GeoEditor 图形界面程序修改编辑成更复杂的器件结构。

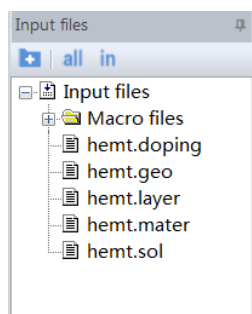
拆分前：



拆分动作(右键点击.layer)：

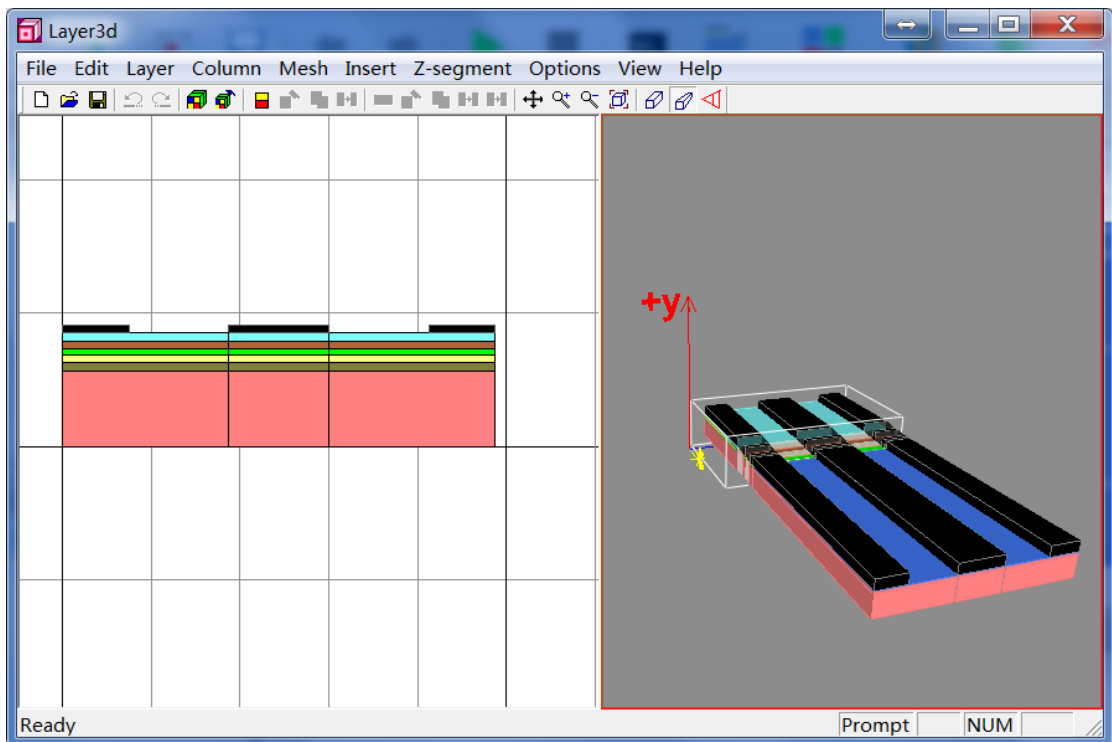


拆分后：



其中，.geo 文件记录了器件的几何结构，.doping 记录了器件中的掺杂分布，.mater 文件定义了器件中的材料（材料名字和 Crosslight 自带的材料库或者用户自己定义的材料库中的材料名字对应）并对材料进行编号。

Layerbuilder 只能用来构建器件的 2D 横截面（在 XY 平面上），而通过在 Z 方向上编辑多个平行的 XY 面上的.layer 文件，Layer3d 图形界面程序能够用来构建 3D 器件结构：

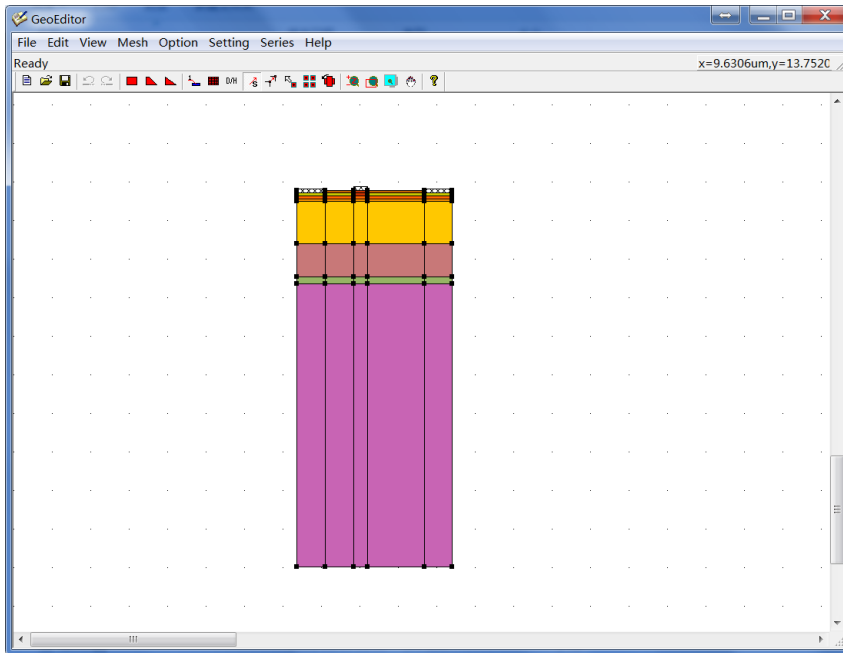


2.2 构建结构方法 2 : GeoEditor/GeoEditor3d

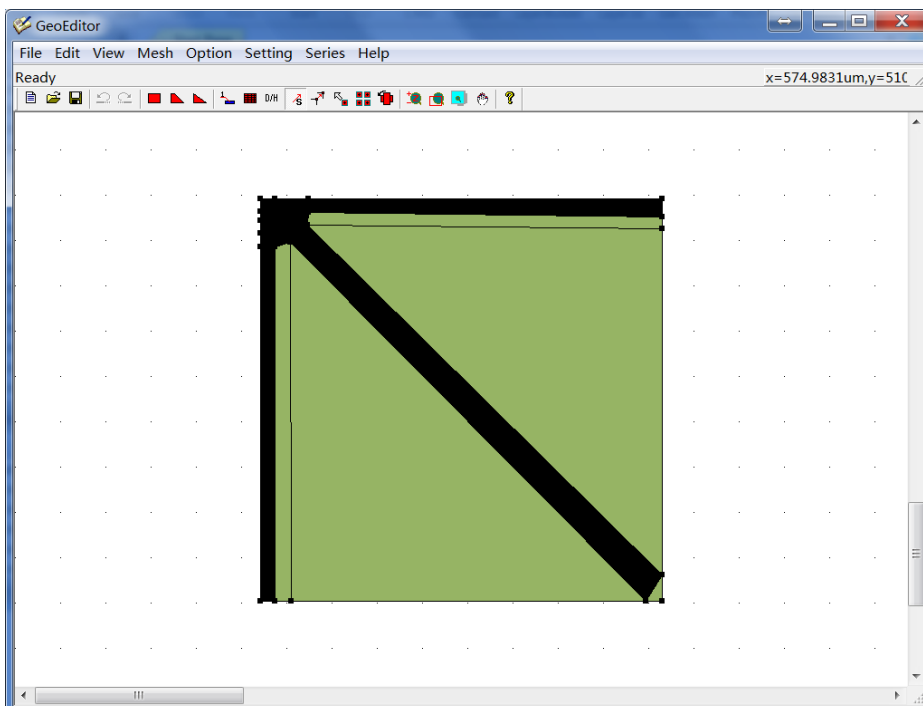
上节提到，.layer 文件会被拆分为.geo，.doping 和 .mater 文件：

```
├─ hemt.doping
├─ hemt.geo
└─ hemt.mater
```

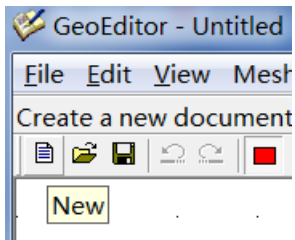
这三个文件可以使用 GeoEditor 图形界面程序进行再编辑：



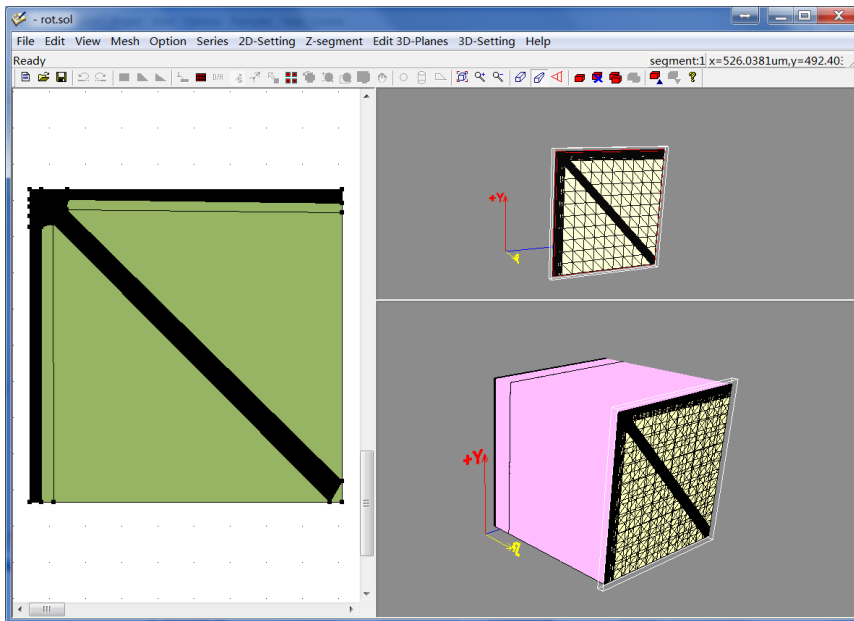
因为 Layerbuilder 只能用于编辑相对简单的外延薄膜结构，而 GeoEditor 通过拼接三角形，长方形，任意四边形和弧形，能够编辑较为复杂的几何图形，如下图所示的复杂电极形状：



GeoEditor 也能够直接新建和编辑.geo, .doping 和 .mater 文件，而不需
要从.layer 文件产生：

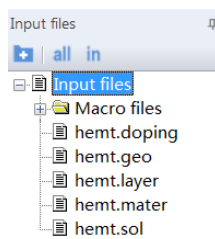


同样地，GeoEditor 只能用来构建器件的 2D 横截面（在 XY 平面上），而通过在 Z 方向上编辑多个平行的 XY 面上的 .geo 文件(以及对应的 .doping 和 .mater 文件)，GeoEditor3d 图形界面程序能够用来构建 3D 器件结构：

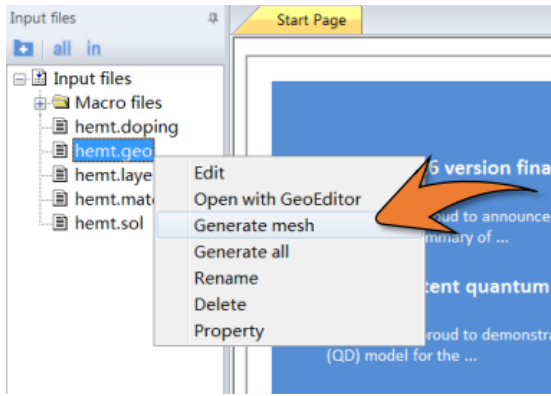


需要说明一下：.geo 文件只定义了几何轮廓和网格划分定义，需要最终处理成为真正的有限元网格，保存于 .msh 文件中，以供 Crosslight 的核心程序调用：

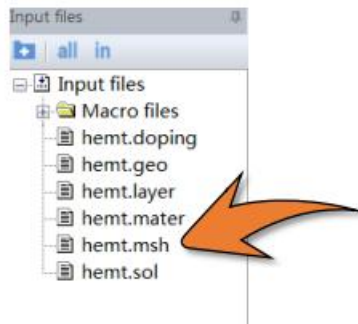
处理前：



处理动作（右键点击 .geo）：



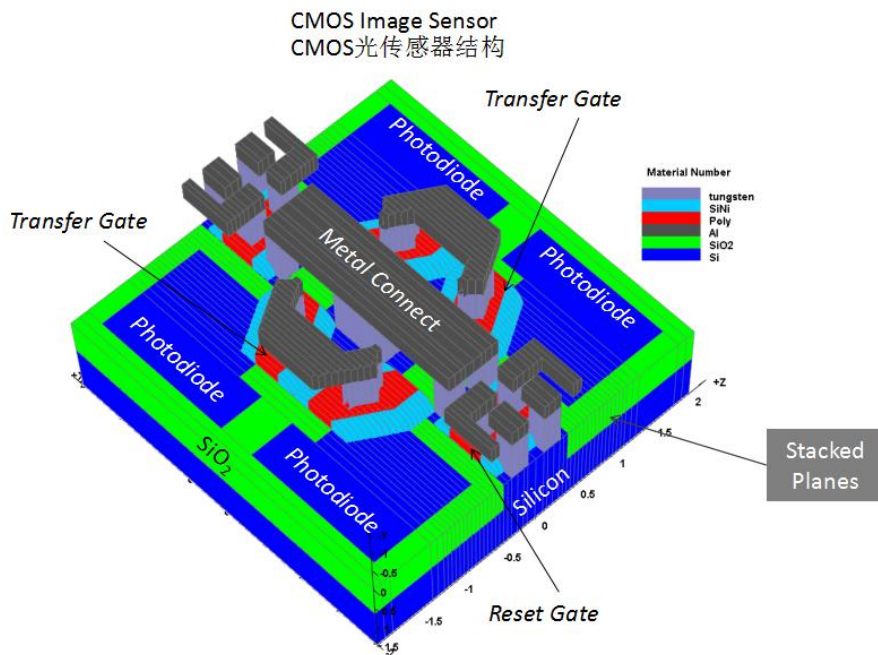
处理后：



2.3 构建结构方法 3：Csuprem 软件

Csuprem 软件不仅用于微电子工艺仿真，也能用于复杂结构的建模，如下

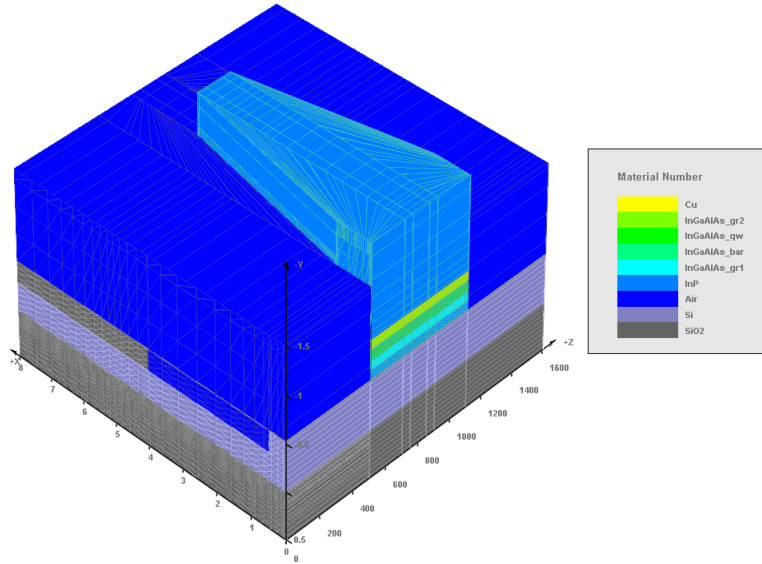
图结构：



结构中的材料也不再局限于微电子工艺仿真涉及到的硅相关材料，而被拓展

为任意的半导体材料,如下图所示的具有 InGaAlAs 四元化合物量子阱的激光器

结构:



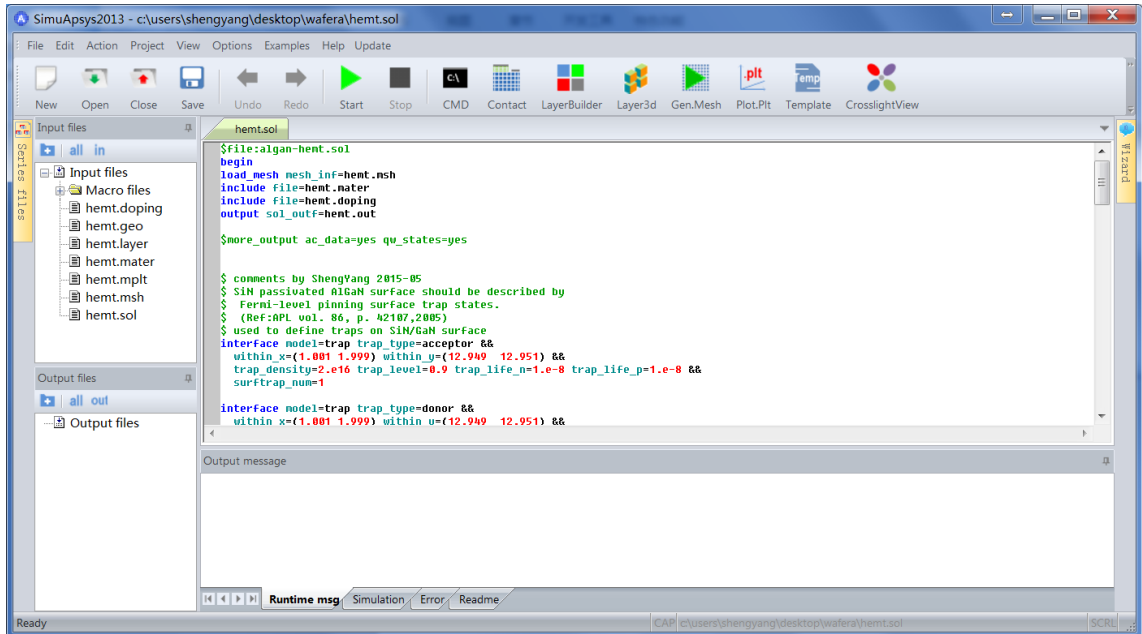
Csuprem 计算得到的结构通过简单的命令就无缝导出到 Apsys/Pics3D 软

件中进行器件仿真:

```
export outf=taper.aps xpsize=0.001
```

3 计算方案

Crosslight 器件仿真软件中的计算方案文件的后缀名为.sol，为英文 solution 的简写，在 SimuCenter 中编写，如下图所示：



3.1 调用器件结构

对于使用 Layerbuilder 和 GeoEditor 产生的结构，.sol 调用的是.msh, .doping 和.mater 文件，如图所示：

```
load_mesh mesh_inf=hemt.msh
include file=hemt.mater
include file=hemt.doping
```

对于使用 Csuprem 导出的文件（如.apc），.sol 调用的是.apc 和 material2D.sol(或者 material3D.sol)文件。material2D/3D.sol 记录了 2D/3D 结构中的材料定义和电极接触的设置，如图所示：

```
include file=zmesh.zst &&
ignore1=load_mesh ignore2=output ignore3=export_3dgeo
load_mesh mesh_inf=taper.apc suprem_import=yes
include file=material_3d.sol
```

3.2 调用物理数学模型

对于特定的器件，需要特定的物理数学模型。

如仿真 APD 器件需要指定雪崩模型：

```

$ Material          alpha_n0  F_cn      alpha_p0  F_cp
$ InP               .836E+09  .155E+09  .157E+09  .994E+08
$ In(0.53)Ga(0.47)As .344E+10  .833E+08  .125E+11  .102E+09
impact_chynoweth elec_set1=(0.836e9 0.155e9 1) &&
    hole_set1=(0.157e9 0.994e8 1) elec_setnum = 1 &&
    hole_setnum = 1 mater = 1
$ Use linear interpolation for InGaAsP from InP and InGaAs
impact_chynoweth elec_set1=(0.22e10 0.155e9 1) &&
    hole_set1=(0.06e11 0.1e9 1) elec_setnum = 1 &&
    hole_setnum = 1 mater = 2

impact_chynoweth elec_set1=(0.22e10 0.155e9 1) &&
    hole_set1=(0.06e11 0.1e9 1) elec_setnum = 1 &&
    hole_setnum = 1 mater = 3

```

GaN 基器件需要指定极化电荷模型：

```
polarization_charge_model screening=0.5 vector=(0 1 0)
```

LED 器件需要指定非局域量子传输模型：

```
q_transport
```

隧穿结仿真需要指定隧穿模型：

```
tunnel_junc yrange=(5.05 5.07)
tunnel_junc yrange=(7.79 7.81)
```

等等。

3.3 器件工作条件设定

器件的性能表现需要在一定的工作条件中得以呈现。

如外偏置电压：

```
scan var=voltage_1 value_to=3.5 print_step=10. &&
    init_step=0.001 min_step=1.e-5 max_step=0.05
```

注入电流：

```
scan var=current_1 value_to=0.1 print_step=10. &&
    init_step=0.001 min_step=1.e-5 max_step=0.005
```

入射光照：

```
light_power spectrum_file = solar.am15g light_dir = top &&
    profile=[2.0,498.0,0.01,0.01]
```

```
scan var=light value_to=1. print_step=10. &&
    init_step=1.e-2 min_step=1.e-5 max_step=0.1
```

电压/电流/光照等外偏置的瞬态脉冲信号：

```
scan var=time value_to=10.e-12 &&
    var2=light function_label2=gs_func &&
    init_step=0.1e-12 min_step=1.d-18 max_step=0.2e-12
scan_function label=gs_func type=gaussian gsn_dt=2.e-12 gsn_t1=1.e-12
```

等等。

4 结果查看分析和数据导出

Crosslight 软件有两种方式提供用户查看分析计算结果，并能够将数据导出，用于更专业的科学作图。

4.1 通过.plt 查看结果

第一种方法通过编写.plt 文件实现：

hemt.plt

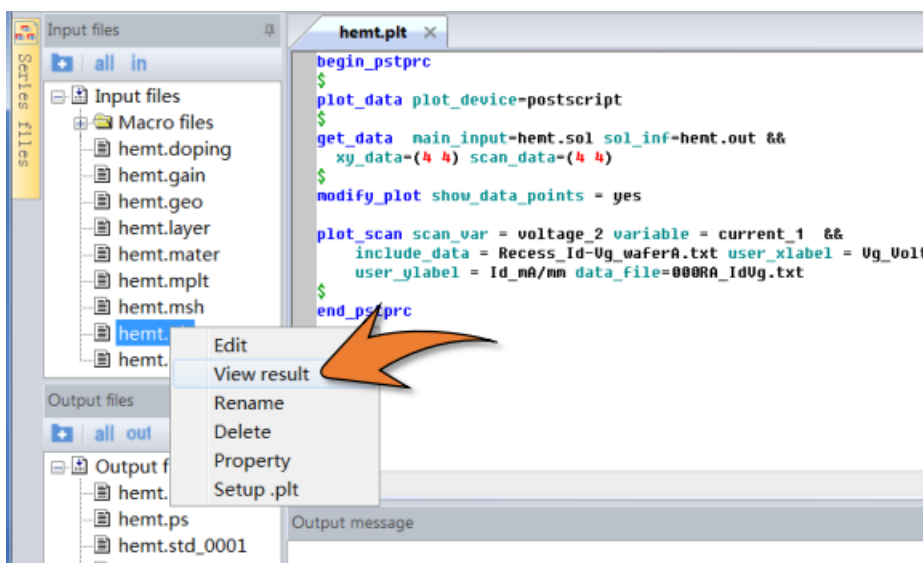
plt 是英文 plot 的缩写，.plt 文件中包含绘制图形的“脚本命令”，在 SimuCenter 中直接编辑：

```

begin_pstprc
$
plot_data plot_device=postscript
$
get_data main_input=hemt.sol sol_inf=hemt.out &&
xy_data=(4 4) scan_data=(4 4)
$
modify_plot show_data_points = yes
$
plot_scan scan_var = voltage_2 variable = current_1 &&
include_data = Recess_Id-Ug_waferA.txt user_xlabel = Ug_Volt &&
user_ylabel = Id_mA/mm data_file=000RA_IdVg.txt
$
end_pstprc

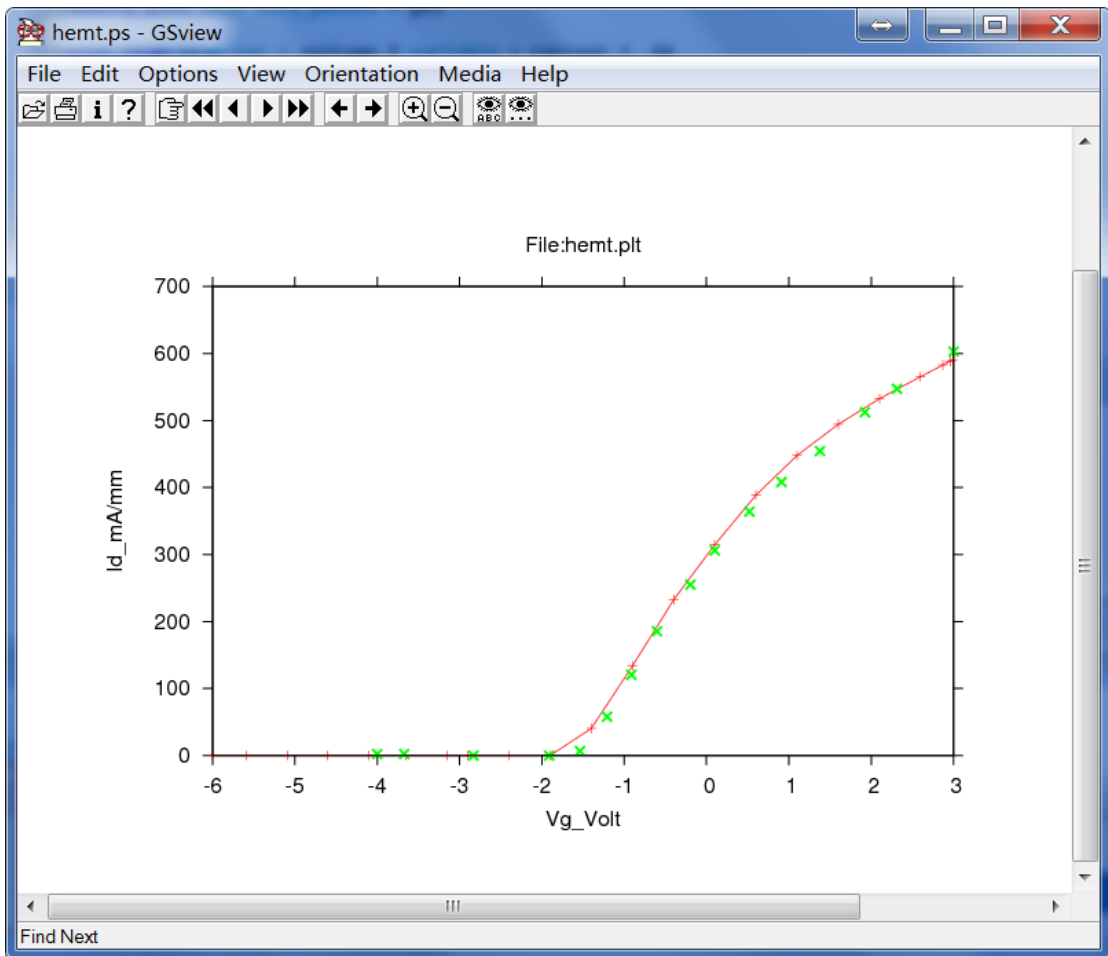
```

.plt 需要经过处理得到图形文件：



得到的图形文件后缀名为.ps ,.ps 文件在开源工具 GSview(用户自行安装)

中以图形方式呈现：



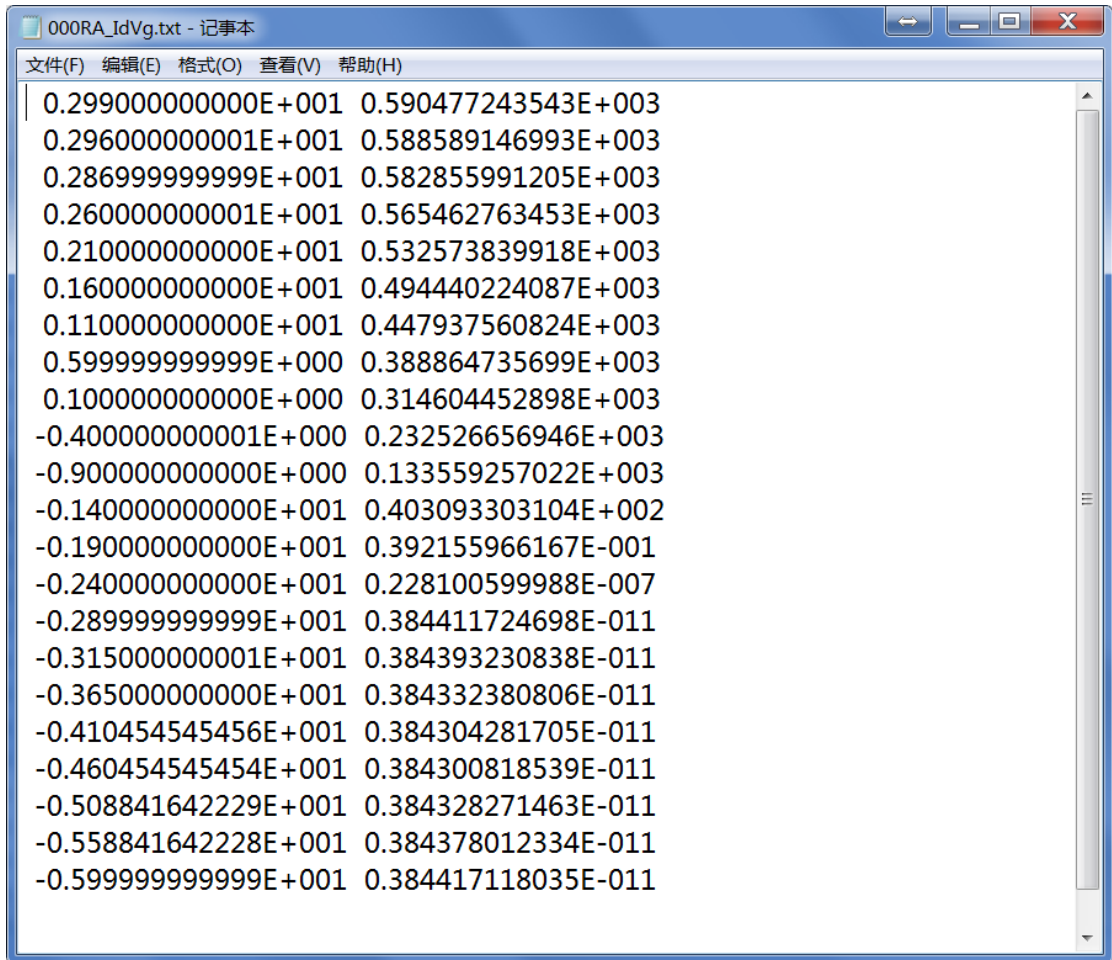
在生成.ps 文件中每一幅图形的同时可以导出文本数据文件：

```

begin_pstprc
$
plot_data plot_device=postscript
$
get_data main_input=hemt.sol sol_inf=hemt.out &&
xy_data=(4 4) scan_data=(4 4)
$
modify_plot show_data_points = yes
$
plot_scan scan_var = voltage_2 variable = current_1 &&
include_data = Recess_Id-Vg_wafer0.txt user_xlabel=Vg_Volt &&
user_ylabel = Id_mA/mm data_file=000RA_IdVg.txt
$
end_pstprc

```

此处的 IV 曲线数据保存在项目同一目录下的 000RA_IdVg.txt 中：



000RA_IdVg.txt - 记事本

文件(F) 编辑(E) 格式(O) 查看(V) 帮助(H)

```

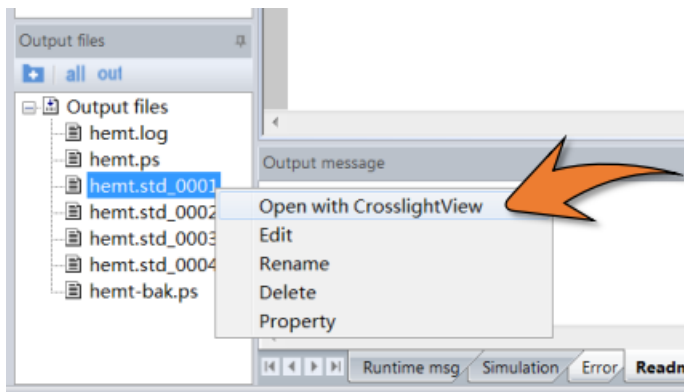
0.299000000000E+001  0.590477243543E+003
0.296000000001E+001  0.588589146993E+003
0.286999999999E+001  0.582855991205E+003
0.260000000001E+001  0.565462763453E+003
0.210000000000E+001  0.532573839918E+003
0.160000000000E+001  0.494440224087E+003
0.110000000000E+001  0.447937560824E+003
0.599999999999E+000  0.388864735699E+003
0.100000000000E+000  0.314604452898E+003
-0.400000000001E+000  0.232526656946E+003
-0.900000000000E+000  0.133559257022E+003
-0.140000000000E+001  0.403093303104E+002
-0.190000000000E+001  0.392155966167E-001
-0.240000000000E+001  0.228100599988E-007
-0.289999999999E+001  0.384411724698E-011
-0.315000000001E+001  0.384393230838E-011
-0.365000000000E+001  0.384332380806E-011
-0.410454545456E+001  0.384304281705E-011
-0.460454545454E+001  0.384300818539E-011
-0.508841642229E+001  0.384328271463E-011
-0.558841642228E+001  0.384378012334E-011
-0.599999999999E+001  0.384417118035E-011

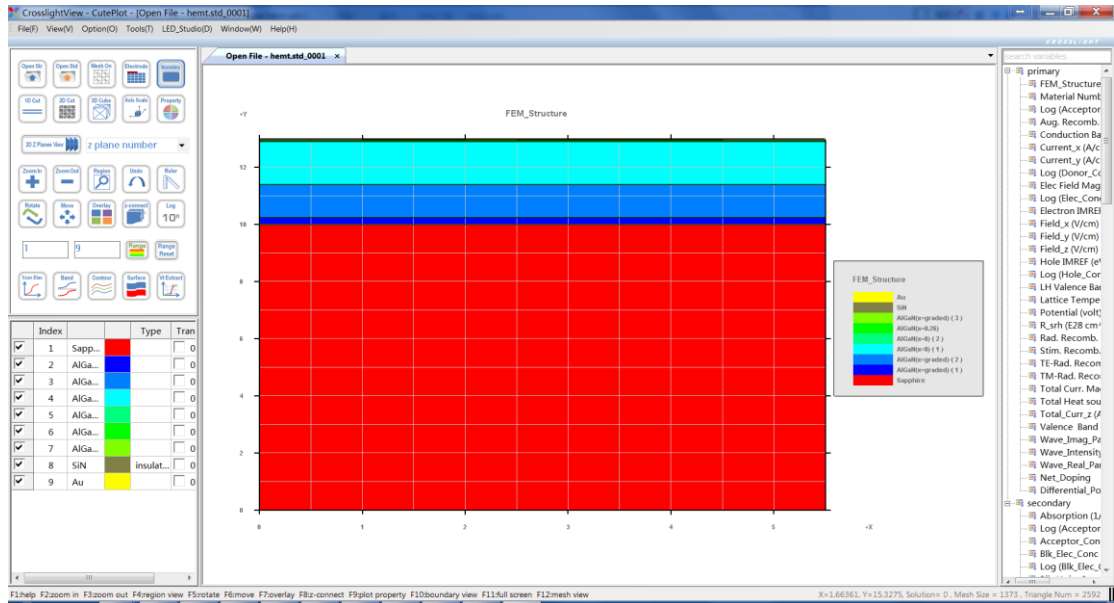
```

用户可以在其它更专业的画图软件中作图。

4.2 通过 CrosslightView 查看结果

第一种方法通过使用 CrosslightView 图形界面程序打开 std_xxxxx 文件实现，其中 xxxxx 是 std 文件的编号：





在 CrosslightView 中，用户可以得到和使用 .plt 脚本命令一样的结果，区别在于 CrosslightView 是使用鼠标操作的全程可视化工具，.plt 是使用键盘手工设置脚本命令。

详细的 CrosslightView 操作请参考其操作指南。

4.3 .plt 脚本和 CrosslightView 两者的优缺点

两者的优缺点如下：

	优点	缺点
.plt 脚本	<p>1 在熟练脚本输入的情况下，能够通过拷贝和修改命令等非常快速地得到大量图形；</p> <p>2 脚本文件编辑保存好后，再作图的时候不需要重复操作。</p>	<p>1 较难掌握，需要一定的脚本编辑基础，不适用于新手；</p>
CrosslightView	<p>1 能够看到结构内部分布图的细节；</p>	<p>1 需要打开结构再查看结果，对于网格多的 3D</p>

	<ul style="list-style-type: none">2 图形界面方便操作；3 新用户容易上手。	<ul style="list-style-type: none">结构处理速度较慢；2 每次作图都需要重复相同的鼠标操作；
--	--------------------------------------------------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------