

COMSOLを用いた光学シミュレーション

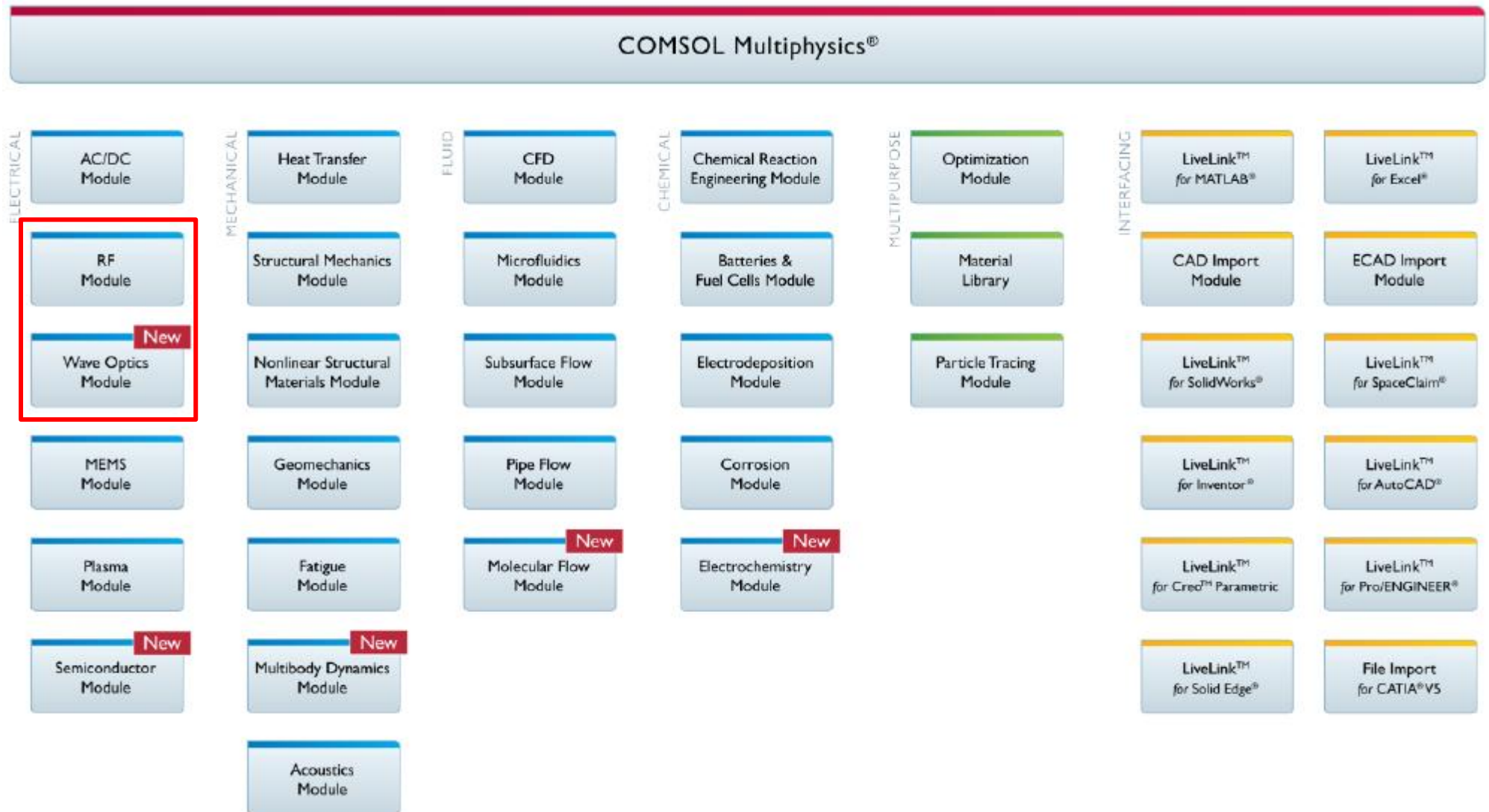
COMSOL CONFERENCE TOKYO 2013
2013年12月6日(金)

CONTENTS

1. COMSOLにおける光学関連モジュール
2. 光学シミュレーションの応用分野
3. 事例紹介
 - 3.1. 有機EL内の光伝播解析
 - 構造による光取り出し効率の変化
 - 3.2. フォトニック結晶方向性結合器
 - 入射光強度の違いによる出力ポートの入れ替わり
 - 3.3. レーザー光の自己収束
4. まとめ

1. COMSOLにおける光学系モジュール

1.1. COMSOL 4.3b のモジュール構成



1.2. RF モジュールとWave Optics Module

	RF Module	Wave Optics Module
特徴	<ul style="list-style-type: none">• 波長に対してそれほど大きくない計算領域に対して柔軟性がある• 回路計算との連成が可能 (Electrical Circuits)	<ul style="list-style-type: none">• 波長に対して非常に大きな構造における計算に対応可能• 波長がゼロとする近似を用いて、大きな構造における光伝播を計算可能 → ただし、回折現象は扱えない (Beam Envelopes)
固有のStudy Type	<ul style="list-style-type: none">➤ Transmission Line Equations➤ Electrical Circuits	<ul style="list-style-type: none">➤ Electromagnetics Waves- Beam Envelopes
共通のStudy Type	<ul style="list-style-type: none">➤ Electromagnetics Waves<ul style="list-style-type: none">- Frequency Domain- Time Explicit- Transient➤ Microwave Heating	

2. 光学シミュレーションの応用分野

2.1. 様々な光学シミュレーション

◆ 光学シミュレーションの応用分野

■ 光ファイバと光通信

- 導波路、結合器

■ 微細構造

- フォトニックデバイス、光学薄膜、有機EL

■ 非線形光学媒質

- 光カー効果、自己位相変調、光パラメトリック増幅

■ 電磁波加熱

- 赤外線加熱、マイクロ波加熱

■ レーザー

3.1. 事例紹介

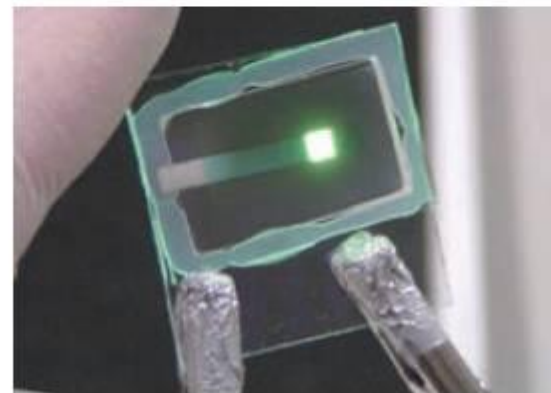
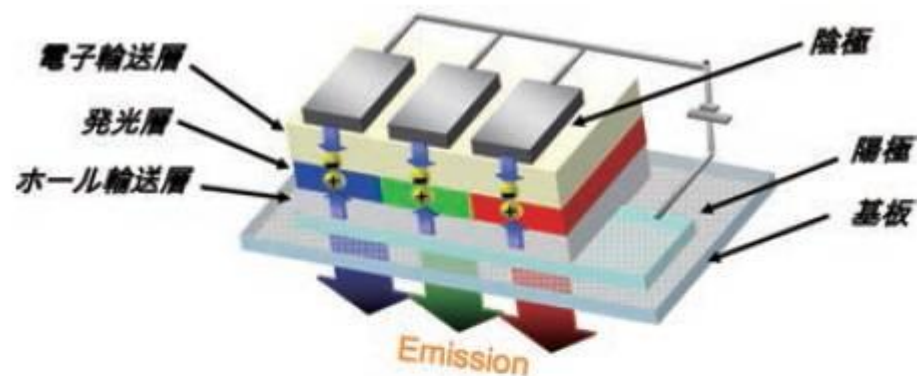
「有機EL内の光伝播解析」

3.1.1. 有機EL

◆ 有機EL:
有機材料内での発光を伴う物理現象、及びその現象を利用した有機発光ダイオード (OLED) や発光ポリマー (LEP) などの製品

◆ 応用例

- ディ스플레이
- 照明
- etc.

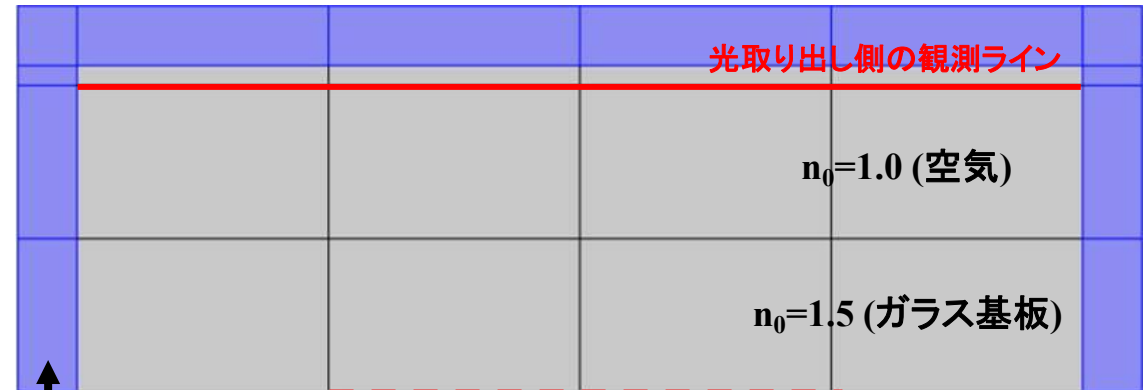


材料科学の基礎、有機EL素子の基礎及びその作製技術参照
http://www.sigmaaldrich.com/etc/medialib/docs/SAJ/Brochure/1/saj1146_mmb1-1.Par.0001.File.tmp/saj1146_mmb1-1.pdf

3.1.2. 有機EL内の光伝播解析 – 計算モデル

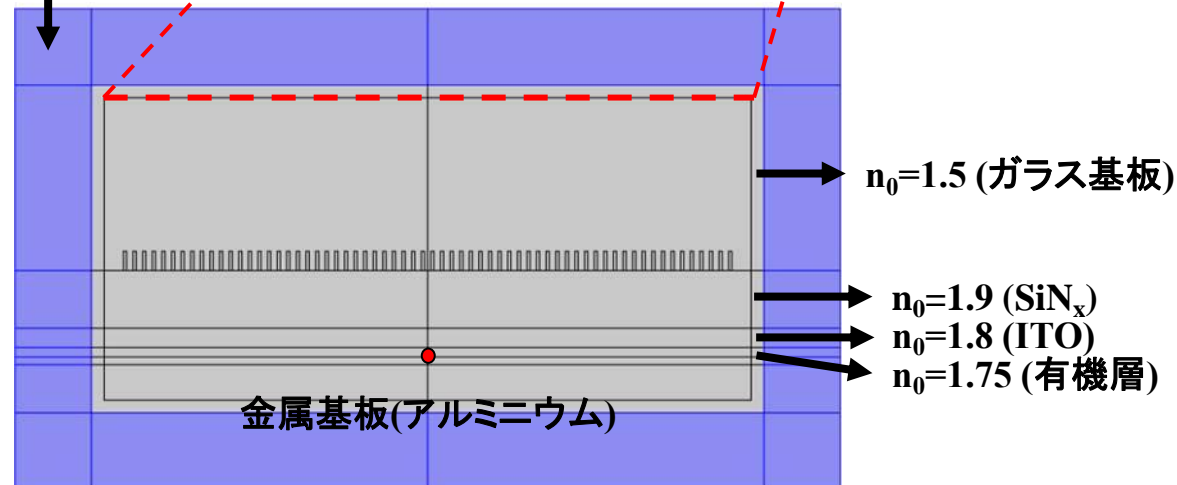
- ◆ 典型的な有機EL構造
- ◆ ガラス基板と SiN_x 層の間に微細構造
- ◆ 構造間距離、高さをパラメータとした時の、光取り出し効率を最大とする最適な構造を算出
(Lee, Kim et al. 2003を参考)
- ◆ 点光源 ($\lambda=530 \text{ nm}$)
- ◆ PML吸収領域
- ◆ 有機EL構造内の計算と、ガラス基板 - 空気間の計算を別モデルで構成
(ガラス基板内の多重反射を考慮しないモデル)
- ◆ 金属基板以外は吸収がないと仮定

【Model 2】



PML吸収領域

【Model 1】の出力を
【Model 2】の入力としてMapping



【Model 1】

(補) 散乱光の分布

◆ 散乱光の分布及び強度は、波長と散乱物質(構造)の関係で決まる

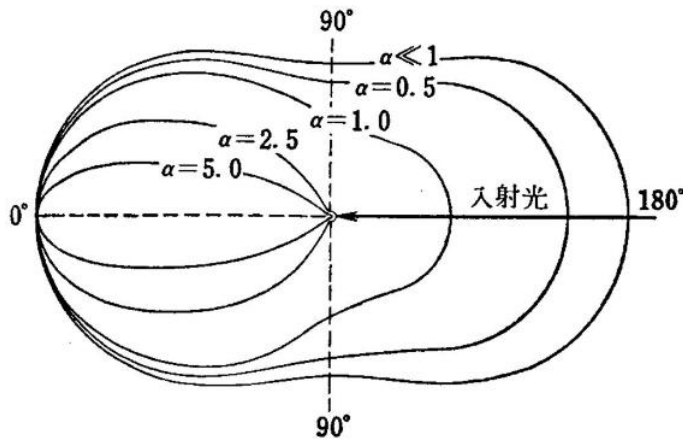
◆ $\alpha = \pi D/\lambda \leq 1$: レイリー散乱 $\Rightarrow I(\theta) = I_0 \frac{2\pi^2 v^2}{R^2 \lambda^4} \left\{ \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\varepsilon_0} \right\} (1 + \cos^2 \varphi)$

◆ $\alpha = \pi D/\lambda > 1$: ミー散乱 $\Rightarrow I(\theta) = I_0 \frac{\lambda^2}{8R^2} (i_1 + i_2)$

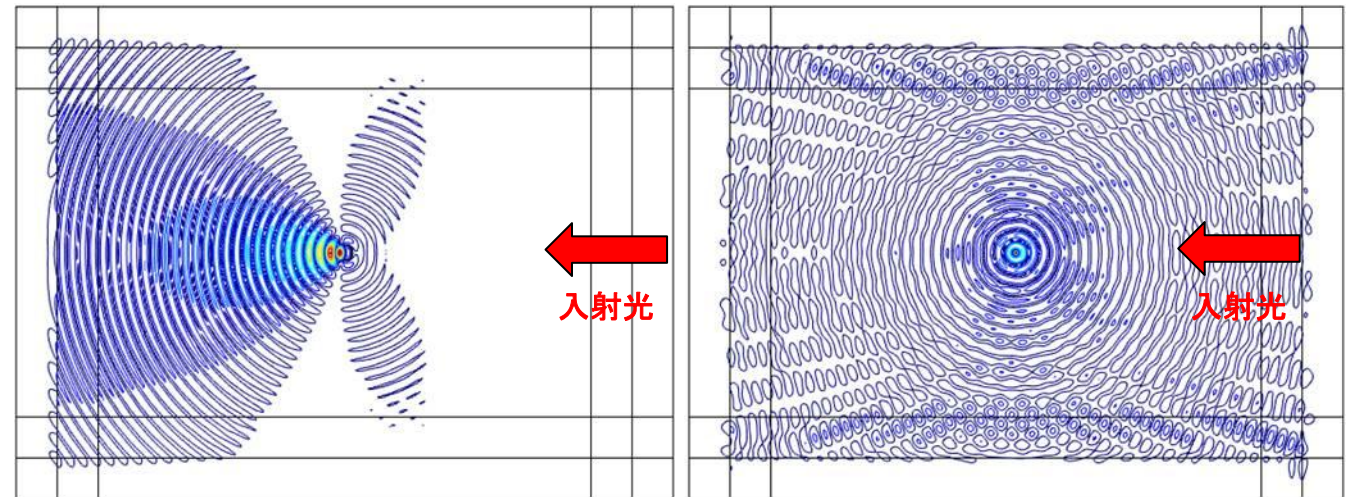
◆ $\alpha = \pi D/\lambda \gg 1$: 幾何学的散乱

◆ 適切なサイズと配置でより多くの光を前方へ取り出せる

【COMSOLによる散乱場の計算】



ミー散乱における配光



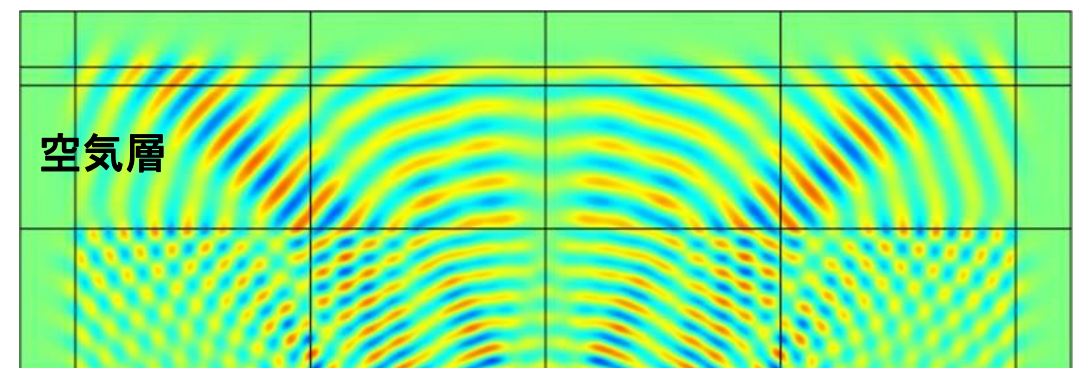
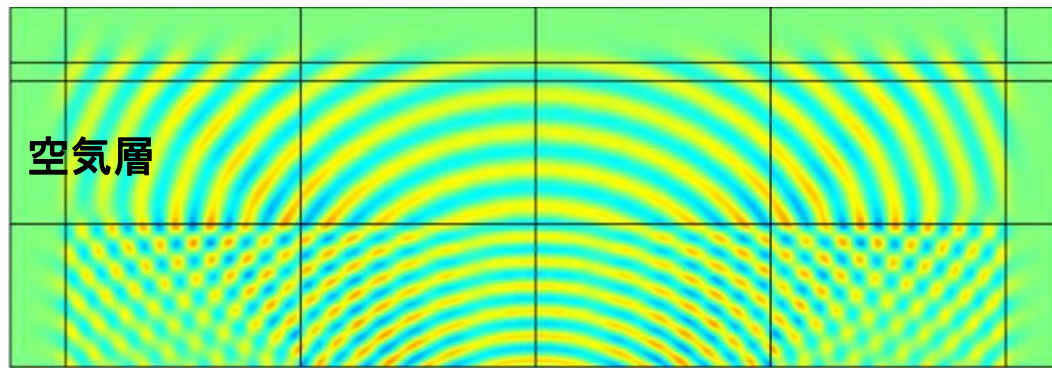
$\alpha \sim 1.0$

$\alpha \sim 0.125$

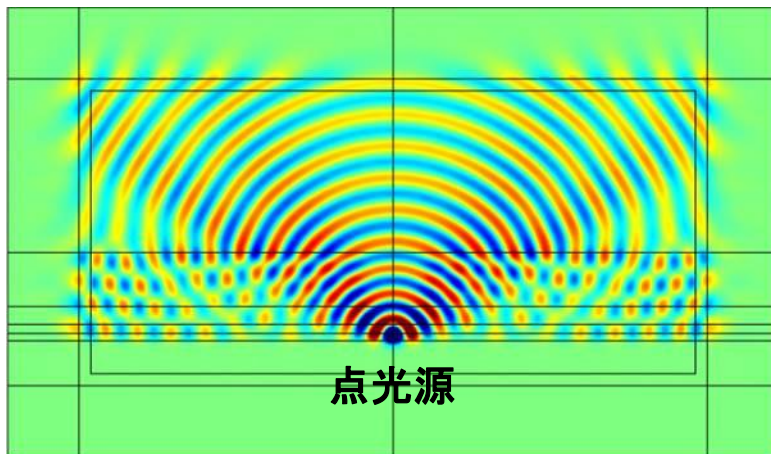
3.1.3. 構造の有無による計算結果の違い

- ◆ 構造有りの場合は、構造無しの場合に比べて空気層へ向ける光取り出し量が増加
- ◆ 構造無しの場合: 27.2 [%], 構造有りの場合: 38.0 [%]

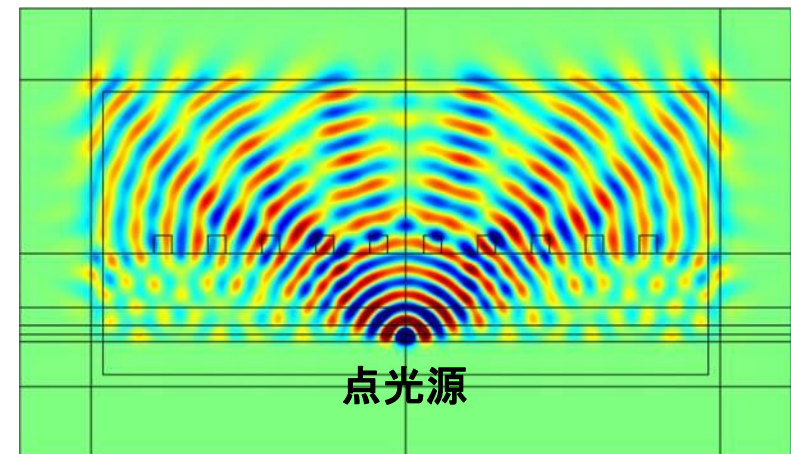
【Model 2】



【Model 1】



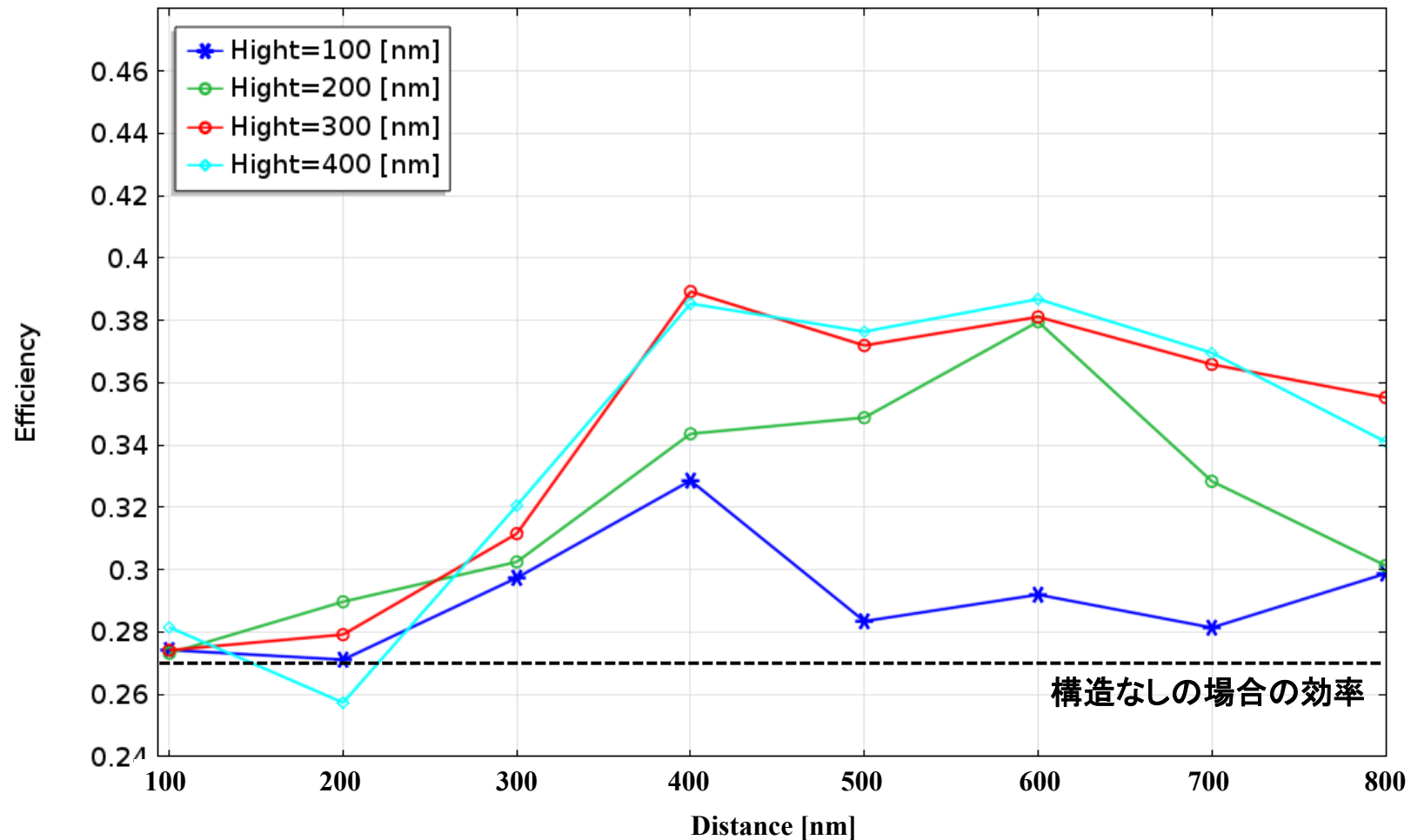
構造なし



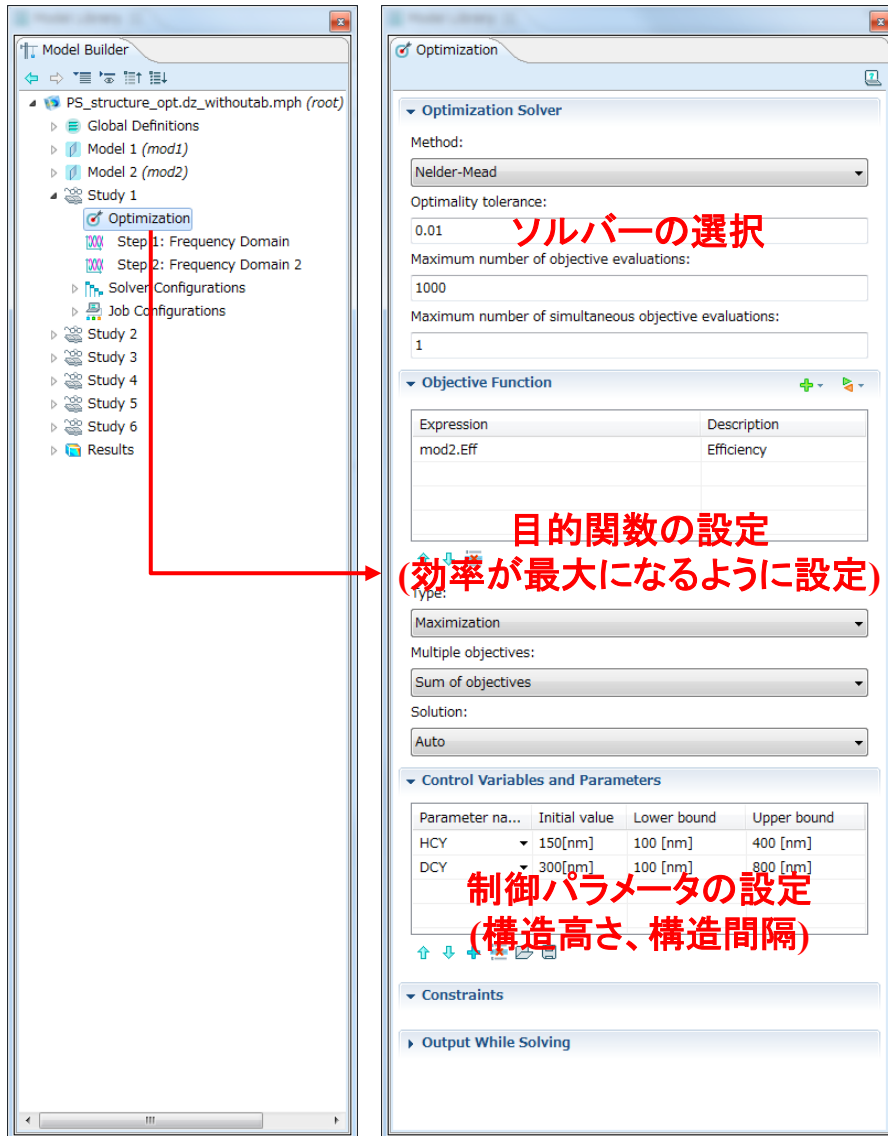
構造あり (高さ= 200 [nm], 間隔= 600 [nm])

3.1.4. パラメータスタディ

- ◆ 構造の高さが大きくなると効率が上がる傾向にある
- ◆ 構造の設定によって最大で11%程度効率が改善される



3.1.5. 最適化ソルバーの適用 – モデル設定

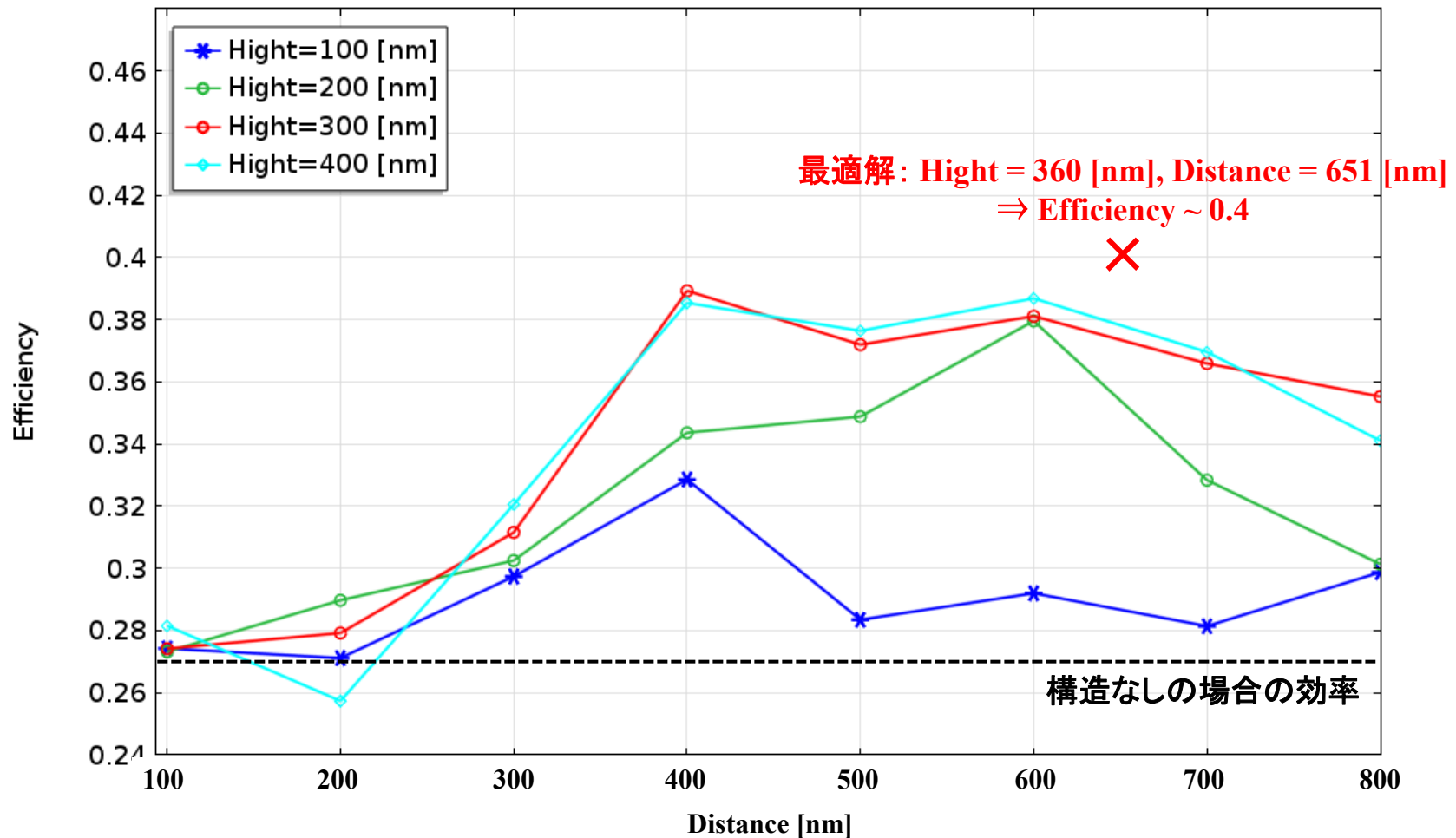


- ◆ 光取り出し効率が最大となるような、最適な構造高さ、構造間隔を算出する
- ◆ 最適化ソルバーの設定において、ソルバーの選択、目的関数の設定、制御パラメータの設定(複数可)を行う
- ◆ 最適化計算を実施する際にさらにパラメータを変更した計算をする場合は、Studyノードを複数準備してバッチジョブを実施 (最適化計算をパラメトリック計算の併用は不可)



3.1.6. 最適化ソルバーの適用 – 計算結果

- ◆ $100 \text{ [nm]} < \text{Hight} < 400 \text{ [nm]}$, $100 \text{ [nm]} < \text{Distance} < 800 \text{ [nm]}$ において、 $\text{Hight} = 360 \text{ [nm]}$, $\text{Distance} = 651 \text{ [nm]}$ の時効率が最大
- ◆ 構造無しの場合と比較して13%程度効率が改善



3.2. 事例紹介

「フットニツク結晶方向性結合器」

3.2.1. モデル設定

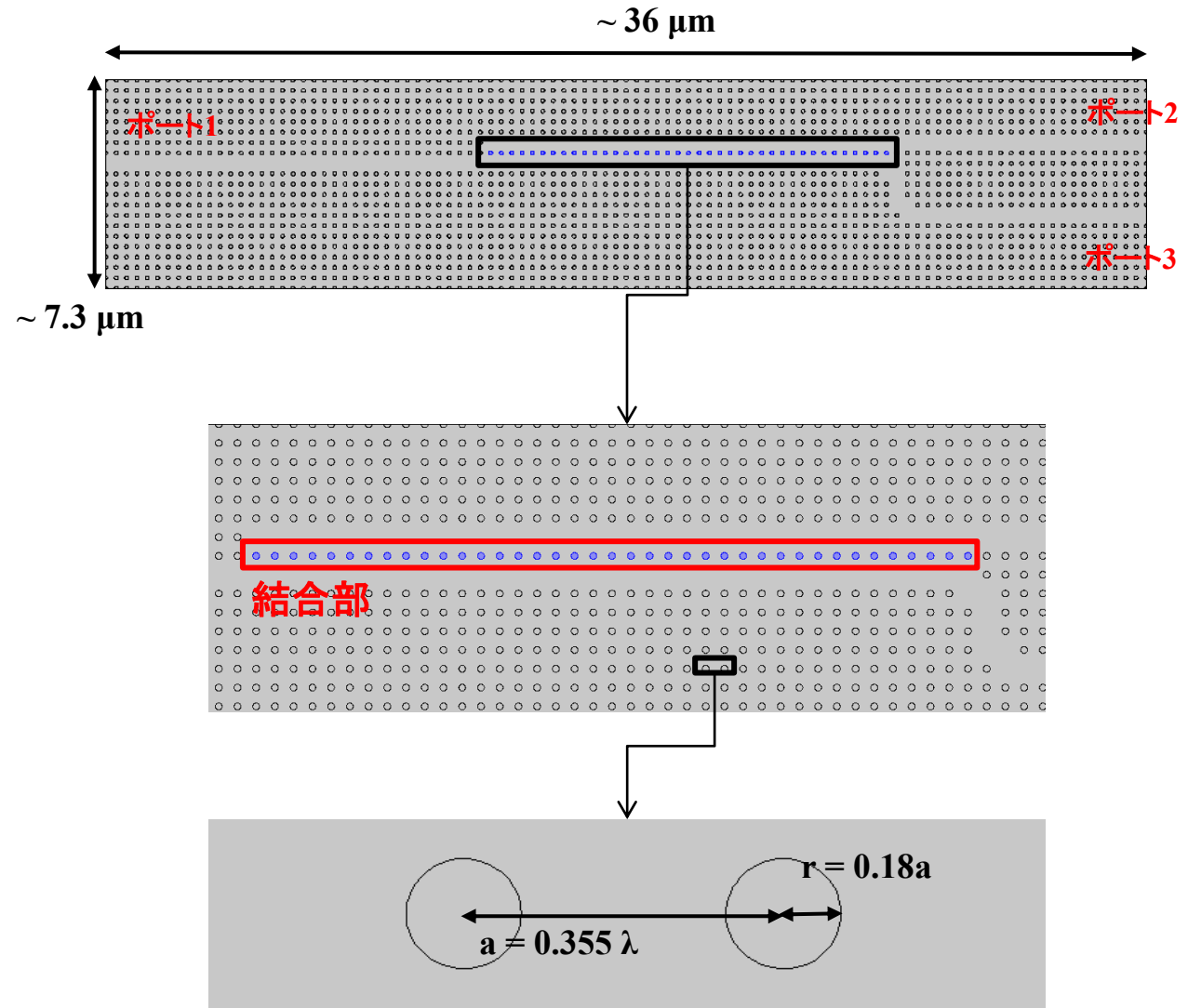
- ◆ フォトニック結晶構造
- ◆ 結合部分の物性値である誘電率を、入射強度に依存するように設定

$$\epsilon = \epsilon_0 + \alpha|E|^2$$

$$\epsilon_0 = 11.56$$

$$\alpha = 0.6377 \times 10^{-11} [\text{m}^2/\text{V}^2]$$

- ◆ 波長: 1.024 [μm]
- ◆ 要素数 \sim 680,000
計算時間 \sim 45分
- ◆ 入射強度を変えたパラメータ
スタディ



3.2.2. COMSOLにおける設定方法

結合部分を選択

誘電率を変数として定義

結合部分で誘電率が電場強度によって変化するように設定

Variables

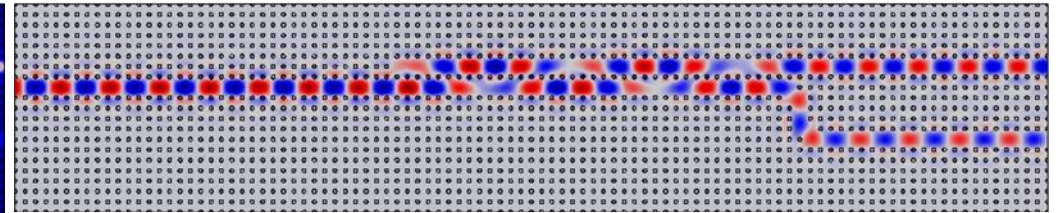
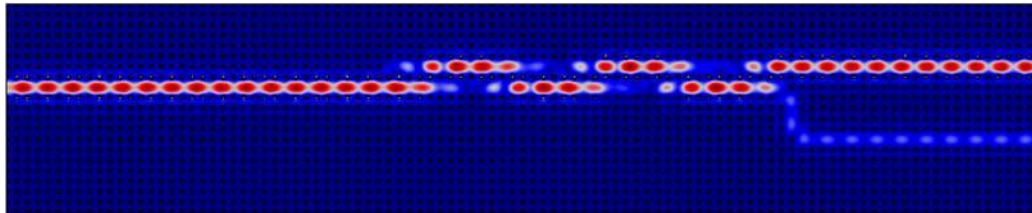
Name	Expression	Unit	Description
Emag	$\sqrt{E_x^2 + E_y^2 + E_z^2}$	V/m	
eps1	$\epsilon_{ps0} + \alpha \cdot \text{abs}(E_{\text{mag}})^2$		

3.2.3. 解析結果 (電場強度及び電場分布)

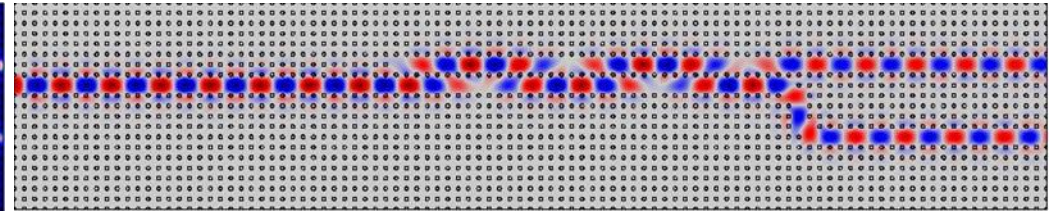
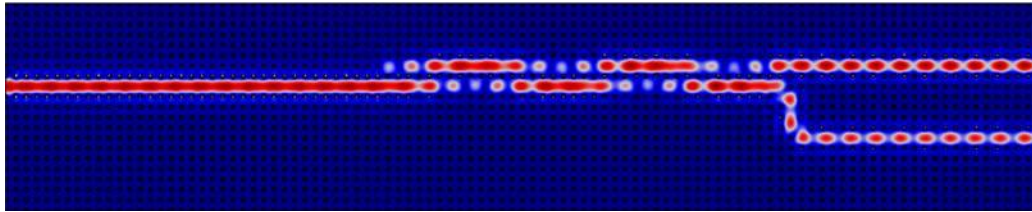
電場強度

電場のz成分

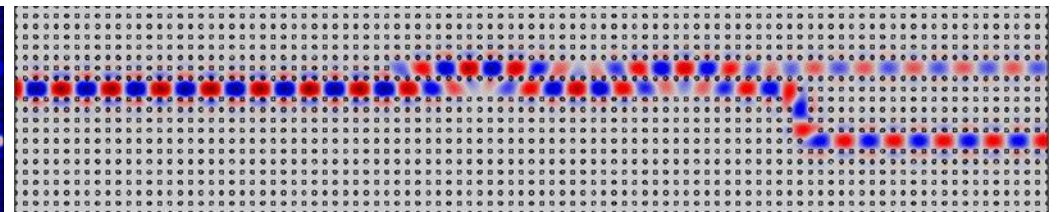
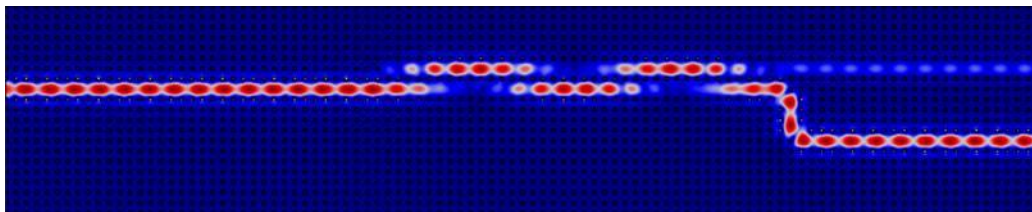
【 $E_0 = 6E5$ 】



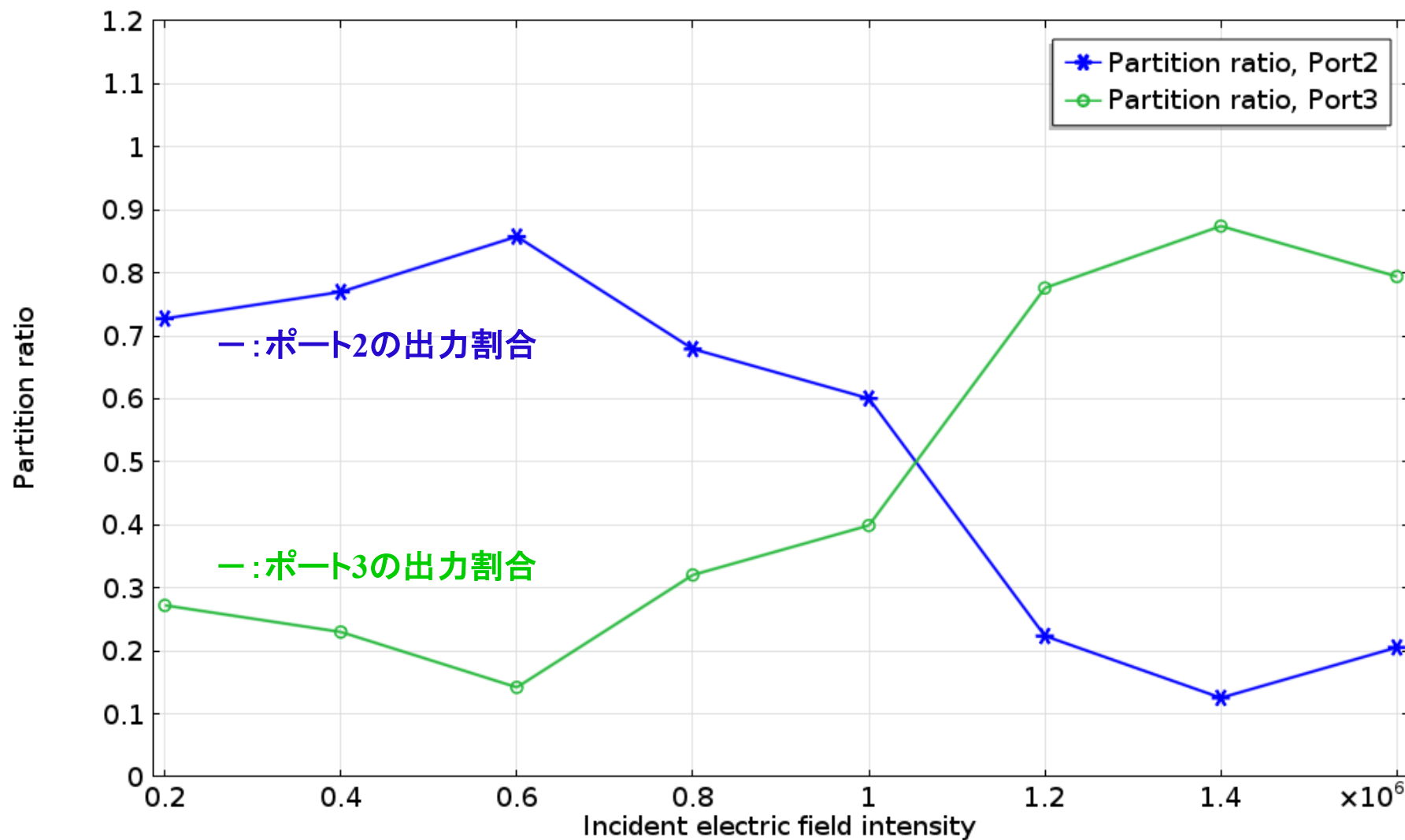
【 $E_0 = 10E5$ 】



【 $E_0 = 14E5$ 】

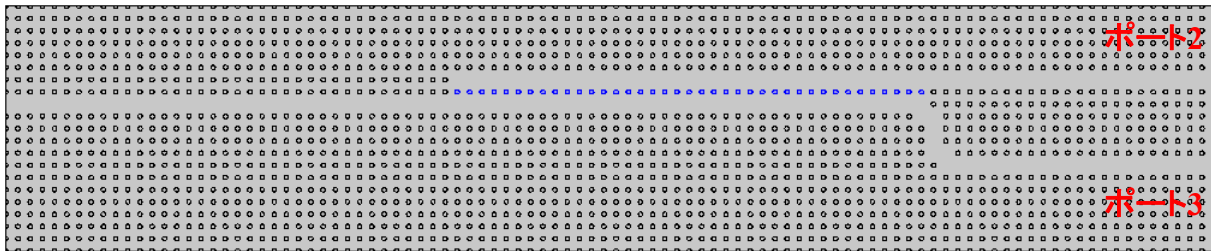


3.2.4. 解析結果(入射強度依存)

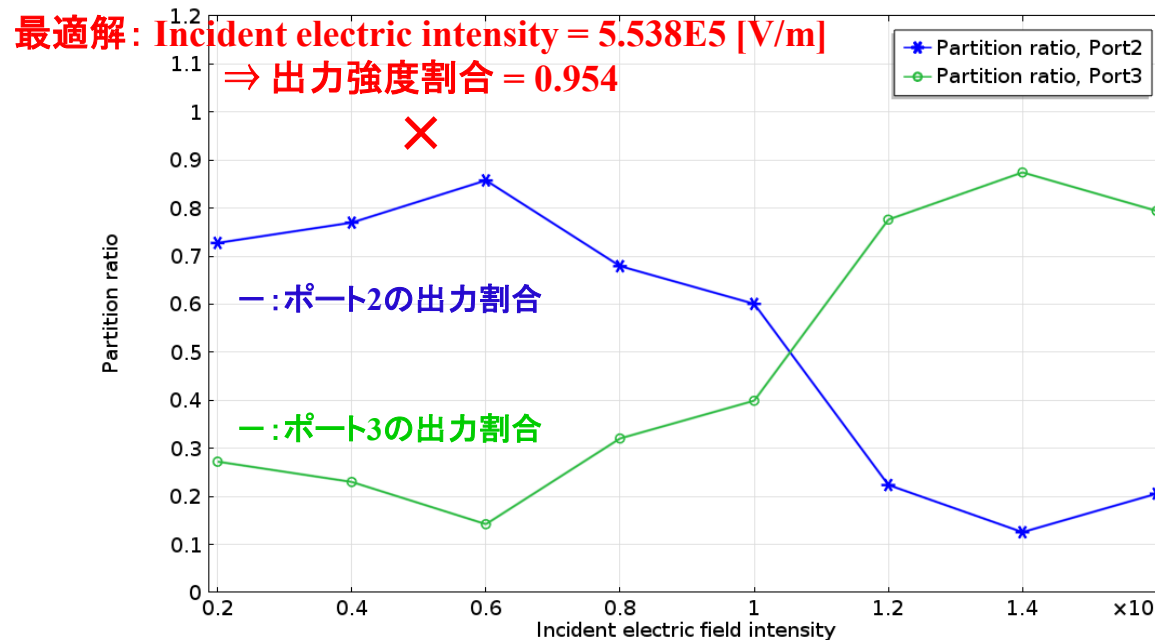


3.2.5. 最適化ソルバーの適用

- ◆ ポート2における出力強度の割合を最大とするように入射強度を最適化
- ◆ 目的関数: 出力強度の割合、制御パラメータ: 入射強度



$$\text{ポート2の出力強度割合} = P_{\text{Port2}} / (P_{\text{Port2}} + P_{\text{Port3}})$$



3.3. 事例紹介

「レーザー光の自己収束」

3.3.1. モデル設定

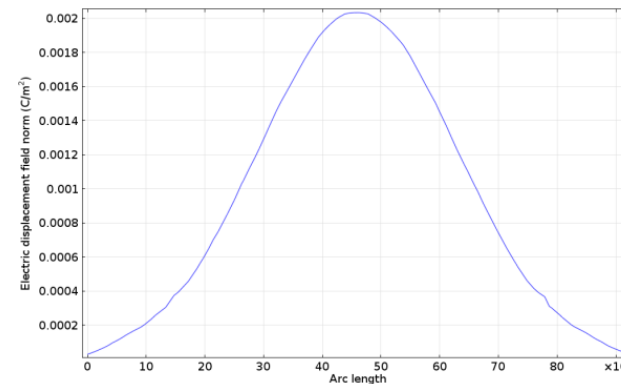
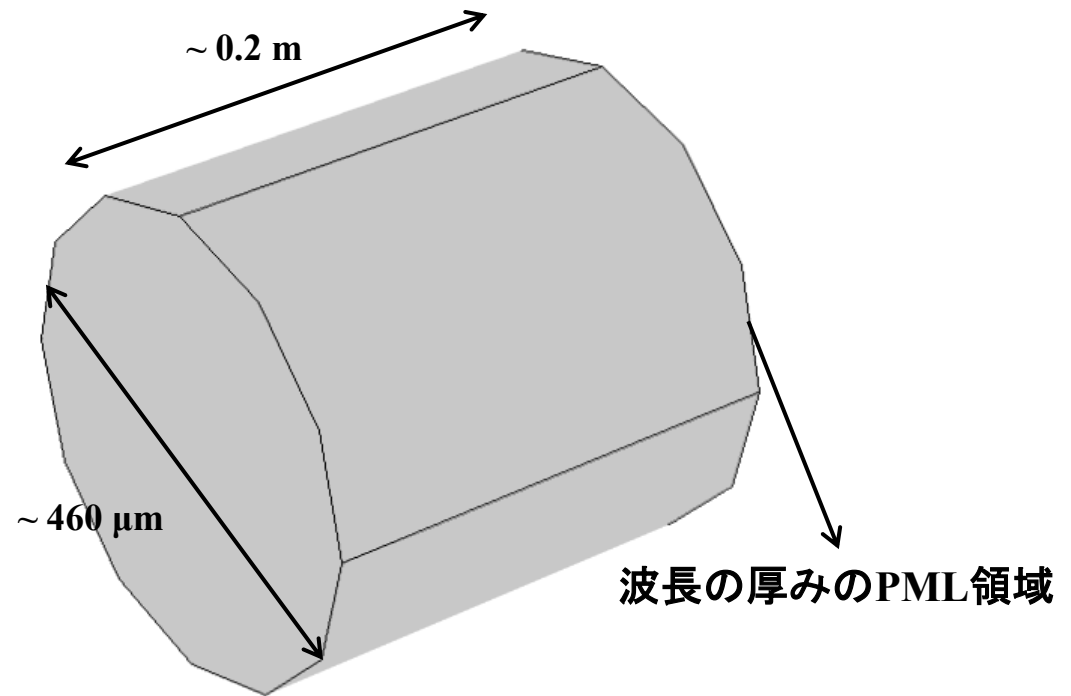
- ◆ Beam Envelopes法を用いたガウスビームの伝搬
- ◆ 光の強度に比例した屈折率を持つ非線形媒質

$$n = n_0 + \gamma I$$

$$n_0 = 1.52$$

$$\gamma = 4E-16 \text{ [cm}^2/\text{W]}$$

- ◆ レーザー終端はPML吸収領域
- ◆ 波長: 1.064 [μm]
- ◆ 入射強度を変えたパラメータスタディ



中心部の強度が大きい
入射光レーザーの強度
分布

3.3.2. Beam Envelopes法

周波数領域解析を解く式:

ヘルムホルツ方程式

$$\nabla \times (\nabla \times E) - k^2 n^2 = 0$$

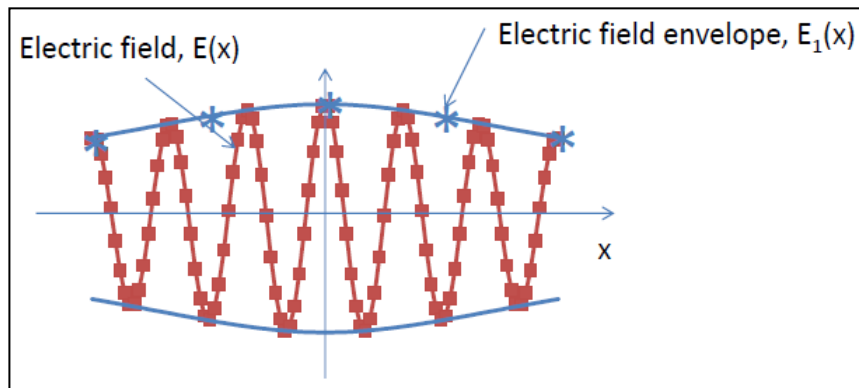
解くべき電界Eを、電界の包絡線部 E_1 と指数関数部として表現.

$$E(r) = E_1(r) \exp(-jk \cdot r)$$

上記式をヘルムホルツ方程式に代入した、

$$(\nabla - jk) \times ((\nabla - jk) \times E_1) - k^2 n^2 E_1 = 0$$

が解くべき方程式.



(※) 条件として、

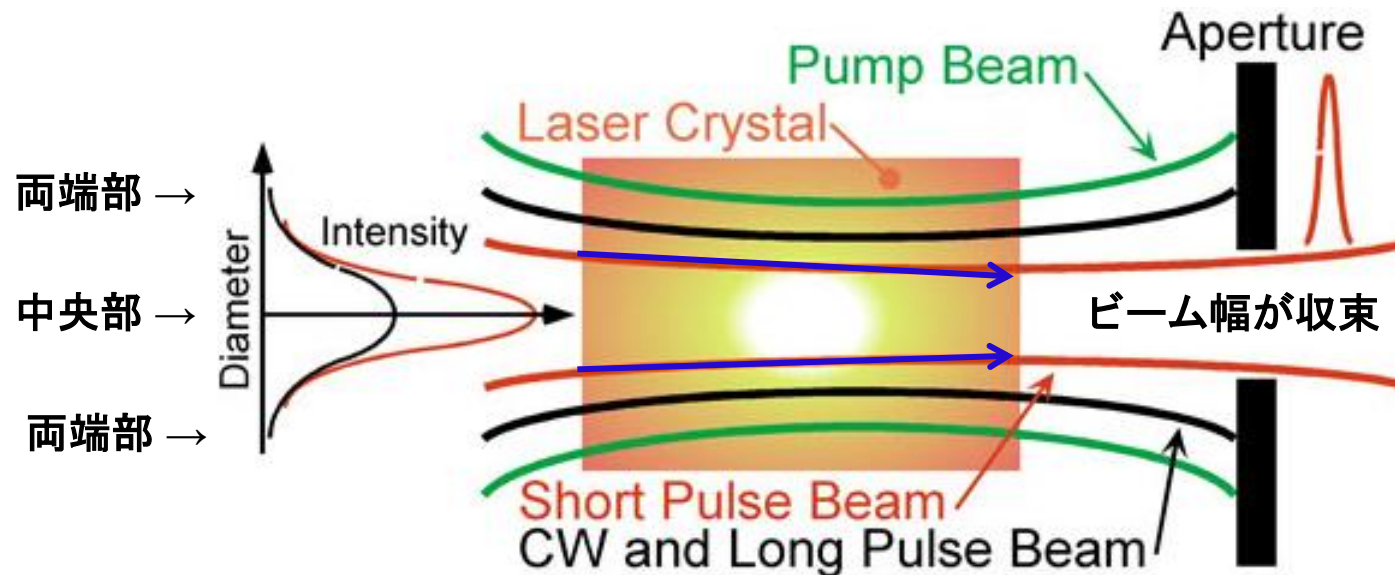
・ E_1 の空間的变化が指数関数部の変化に比べて十分小さい必要がある。

$$|dE_1/dx| \ll |kE_1|$$

・光の伝搬方向が既知。

3.3.3. 自己収束

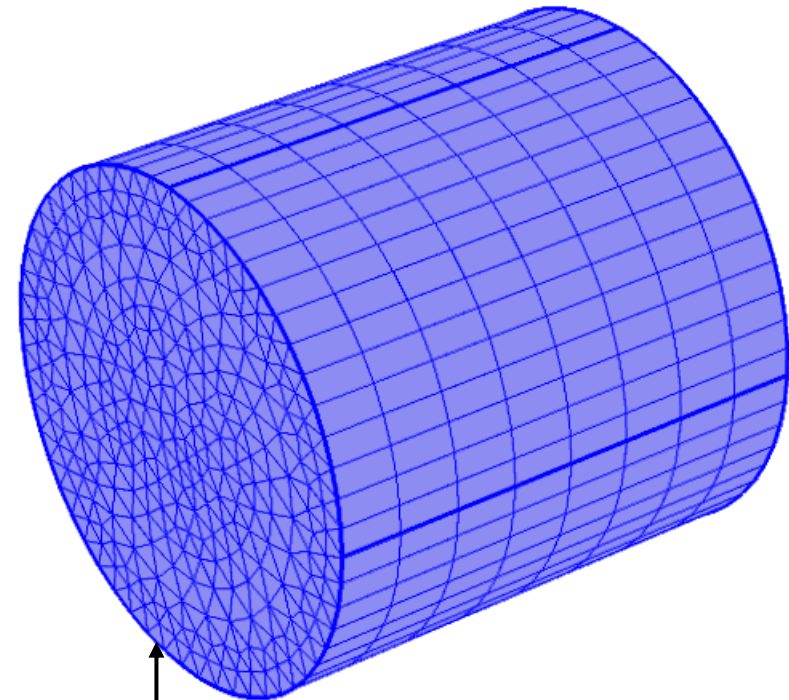
- ◆ 中央部分の強度が強く、両端にいくほど強度が弱くなるガウス型の断面をもつパルス光が非線形光学媒質に入射
- ◆ 中央部分では光の強度が強くなり、屈折率が大きくなり、自己位相変調が起こる
- ◆ 中央部分では光が進みにくくなり、レンズを通じたかのように集光する = 自己収束



(※) 日本光学会ホームページより

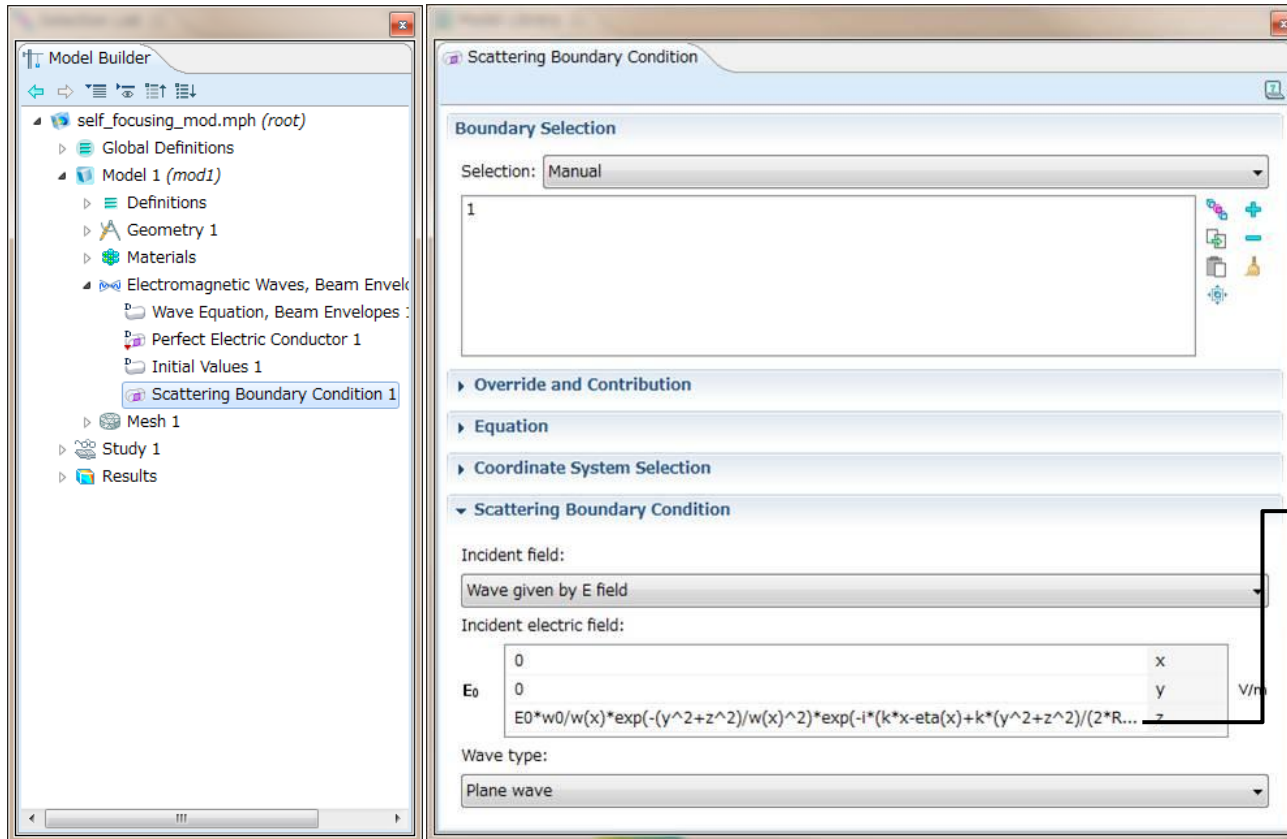
3.3.4. 計算コスト

- ◆ 要素数：～8,200
計算時間：～10分
- ◆ Beam Envelopes法では波長を分解するメッシュサイズは必要なく、コストを大幅に削減できる
- ◆ 通常の周波数解析では、 $h \sim \lambda/6$ 程度のメッシュサイズが必要だとすると、 10^{10} 程度の要素数が必要であり計算は不可能

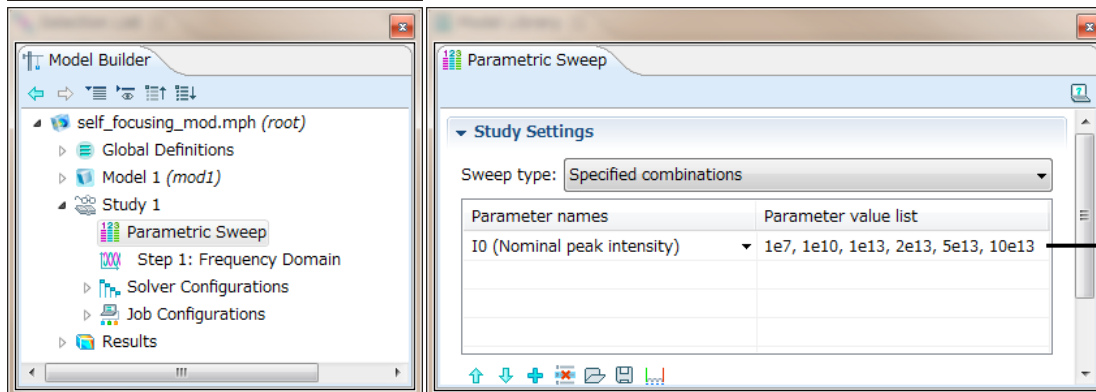
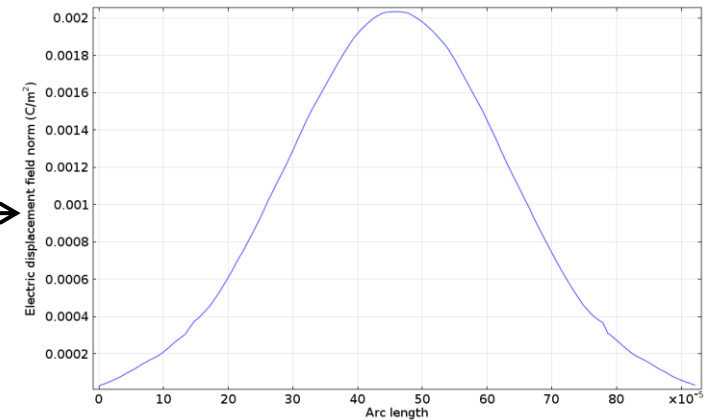


メッシュの最大サイズを入射強度分布幅の $\frac{1}{2}$ で設定

3.3.5. COMSOLにおける設定



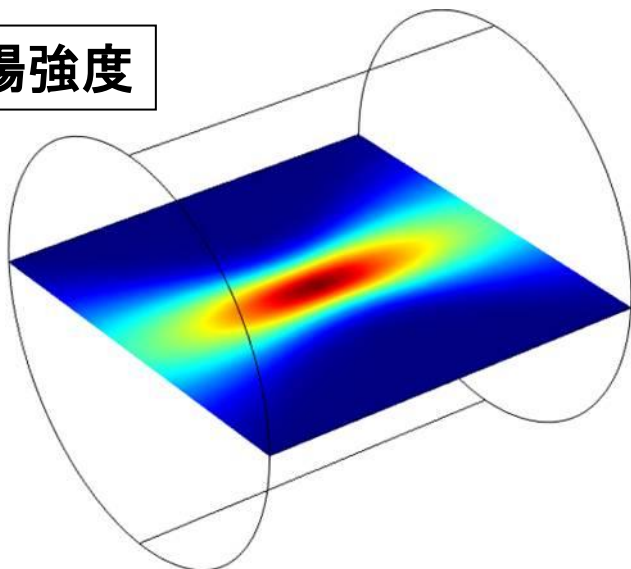
入射フィールドの強度分布を設定



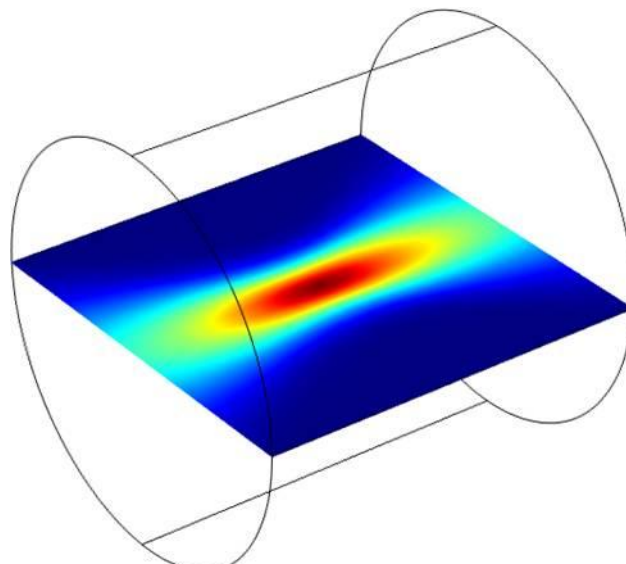
【パラメータスタディ設定】
入射強度 I_0 [W/m²]を、
 $I_0 = 1E7, 1E10, 1E13, 2E13, 5E13, 10E13$
として計算を実施

3.3.6. 解析結果(電場分布)

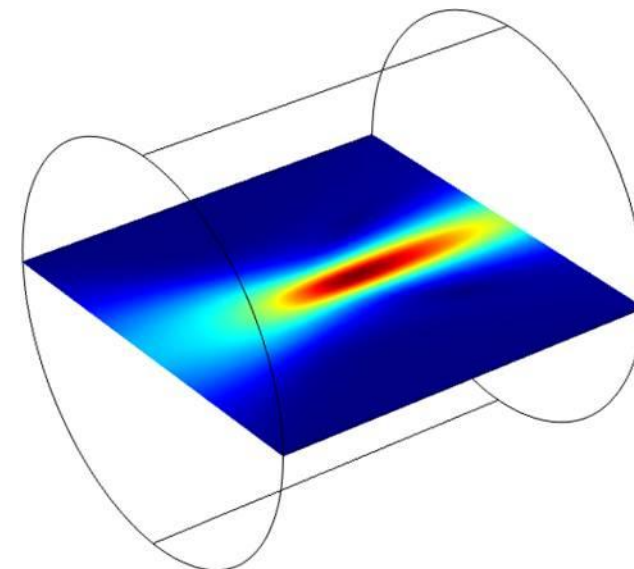
電場強度



$I_0 = 1E7$ [W/m²]

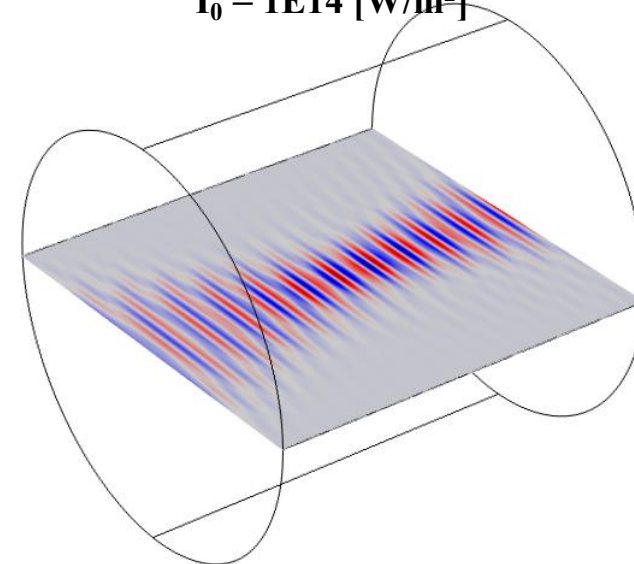
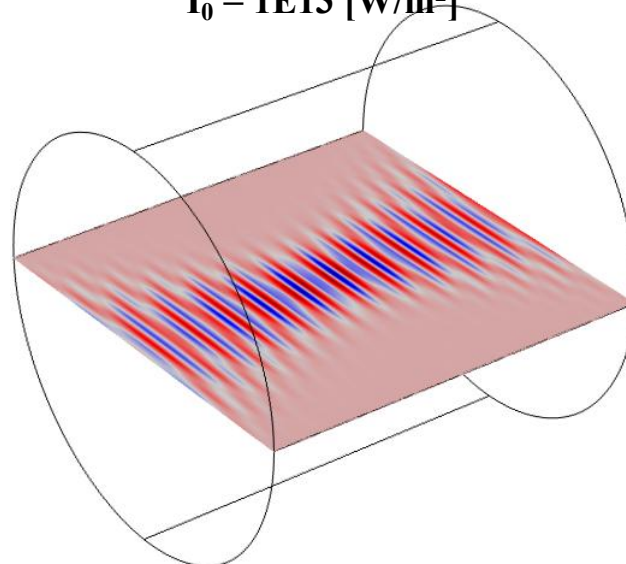
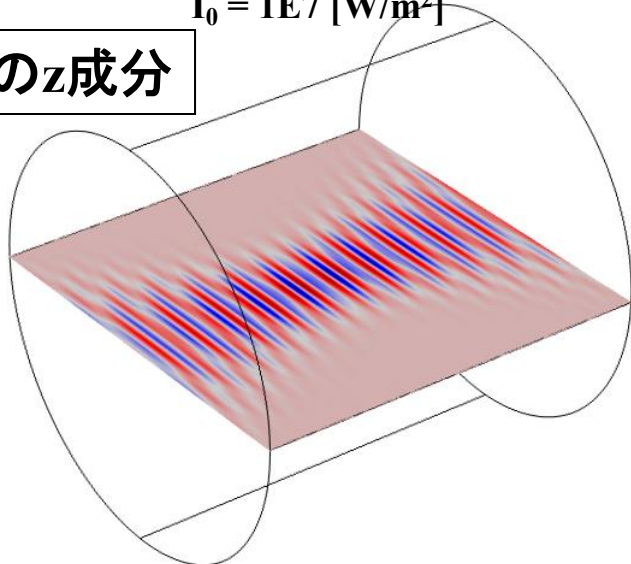


$I_0 = 1E13$ [W/m²]

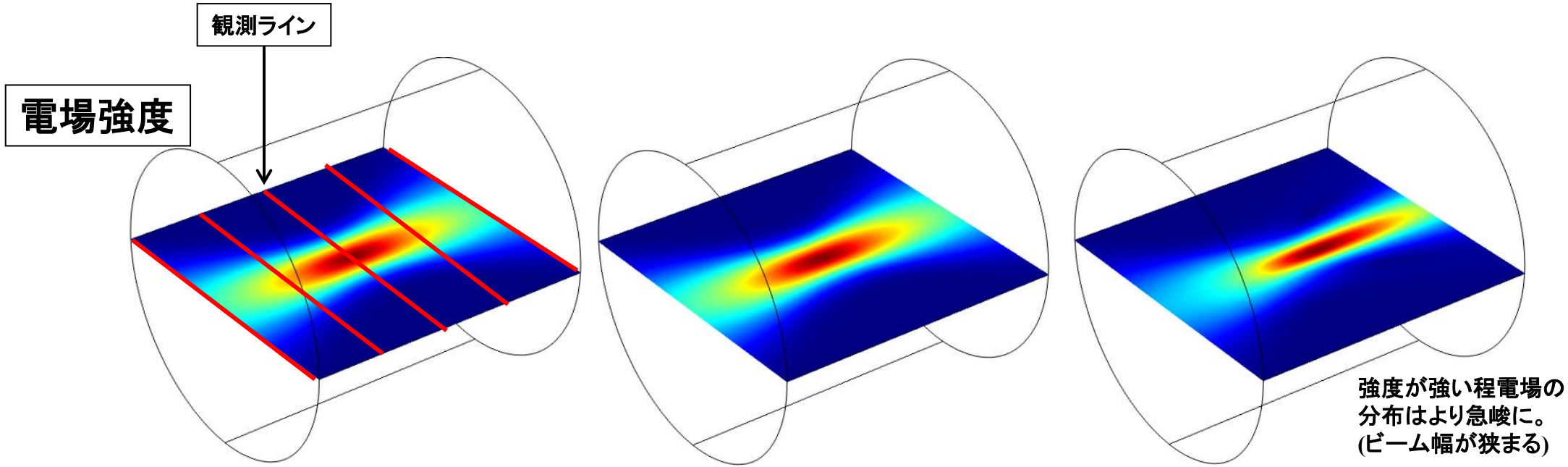


$I_0 = 1E14$ [W/m²]

電場のz成分



3.3.6. 解析結果(電場分布)

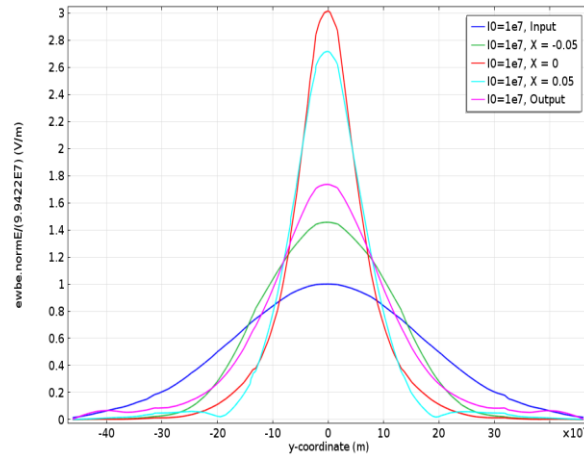
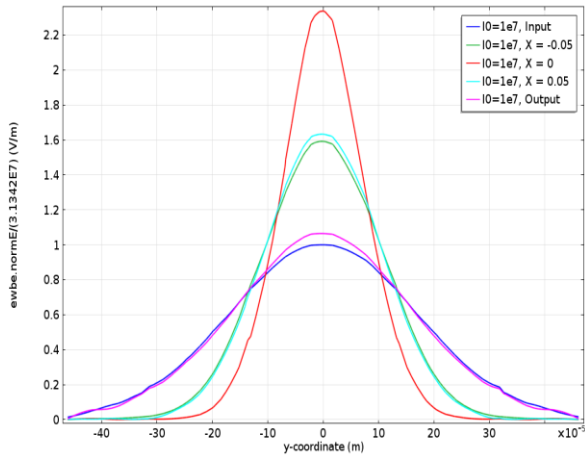
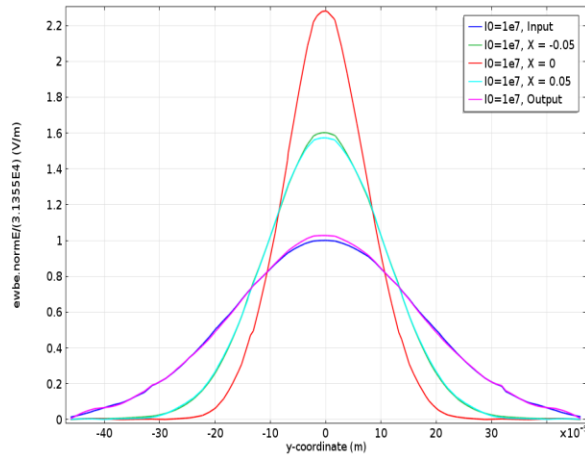


強度が強い程電場の分布はより急峻に。
(ビーム幅が狭まる)

$I_0 = 1E7 [W/m^2]$

$I_0 = 1E13 [W/m^2]$

$I_0 = 1E14 [W/m^2]$



4. まとめ

- ◆ 光学シミュレーションを再現するためのモデルはCOMSOLに備わっており、ユーザーが適切な設定を行えば様々な現象を解析可能
 - ◆ 解析対象に応じてStudy Typeを選択
 - 解析対象のサイズが波長と同程度
 - 散乱現象を含む
 - 解析対象のサイズが波長に比べて十分大きい
 - 波の伝搬方向が既知
 - 波束の振幅が緩やかに変化
 - 入射強度等が時間と共に変化
- } Frequency Domain
} Beam Envelope
} Transient, Time Explicit

5. 弊社サービスメニュー

■COMSOLの販売

- 基本モジュール

- オプションモジュール

■カスタマイズサービス

- COMSOLのカスタマイズ

- 解析モデルの作成

- アプリケーション販売 – めっき解析、腐食解析

- アプリケーション開発 – Livelink機能を用いたCOMSOLの制御、専用モジュールの開発等

■受託解析サービス

- モデリングからシミュレーション、評価

 - 光学、めっき・腐食解析、燃料電池・リチウムイオン電池解析、プラズマ解析等

■導入サポート、保守サービス