

ミックスレベルシミュレーションを利用した LED/OLED デザイン

March 2016

Authors

Mayank Bahl
Senior Staff
Scientist, Synopsys

Dan Herrmann
CAE Manager,
Synopsys

はじめに

過去 20 年以上にわたり、発光ダイオード(LED)の設計を改善、光取り出し効率の向上、ビーム成形の改善、色調の調整を可能にするための研究が幅広く行われてきました。そしてパターン化基板、偏光感受性グレーティング、バックリフレクター、表面テクスチャー、蛍光体のダウンコンバージョンなどの技術が検討されてきました。有機 EL は、低コストで製造工程が簡単、薄膜構造であり、良好な分光特性を有することから、近年注目されているデバイスです。有機 EL は、リジッド基板とフレキシブル基板の両方に作製できるため、カラーディスプレイや固体照明など、幅広い応用が期待されています。

LED や有機 EL に用いられる幾何学的構造の範囲や規模が大きいため、その性能を効率的かつ正確に解析し、効率を最適化するためには、様々な数値解析技術が必要となります。本論文では、電磁波レベルおよび光線レベルのツールを統合的に使用するミックスレベルシミュレーションアプローチの使用方法を紹介します。このアプローチでは、厳密な電磁波ベースのツールを使用して、ナノ構造表面からの散乱と発行領域からのファーフイルドの角度強度分布を完全に特性化します。これらの特性を光線追跡シミュレータに組み込むことで、デバイスの全体的な性能を得ることができます。このアプローチでは、電磁波レベルのツールと光線レベルのツールの間で完全なデータ転送を行い、他の手段では不可能な偏光を含む厳密な包括的モデリングを可能にしています。

課題: LED/OLED の一般的な光学特性について

光学シミュレーションは、LED や OLED の動作の基礎となる物理的な特性を調べ、その性能を向上させるための設計上のヒントを得るための重要なツールとなっています。どのシミュレーション手法を採用するかは、通常、特定の問題の光学的側面によって決定されます。LED と OLED はますます複雑になっており、次のような光学設計の側面が含まれることがあります。

- ▶ 幾何学的特徴の大きさの桁が異なる:
 - 薄膜
 - マイクロ/ナノパターン構造
 - 厚い平面層 例: 基板
 - パッケージングに伴う大型構造
- ▶ 効率向上のための周期的なパターン化構造
- ▶ 拡散体、表面散乱体、体積散乱体
- ▶ ダイ配置の最適化
- ▶ 光源の非干渉性

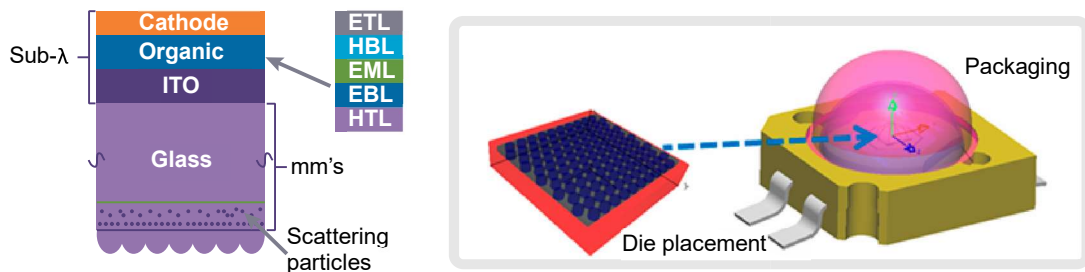


図 1: OLED/LED 設計の典型的な側面を示す図
(a)簡略化された OLED 構造 (b)パッケージングに関連する大きな構造

下表に示すように、1 つの光学シミュレーションツールでこれらすべての側面に対応できるわけではありません。

光線ベースの光学シミュレーションツール	電磁光学ベースの光学シミュレーションツール
<p>幾何光学に基づくモンテカルロ・レイトレーシング (RT) のような光線光学に基づく技術。RT では、システムを光線の集合体としてモデル化します。界面における透過/反射の角度と強度は、フレネルの法則によって決定されます。</p> <p>RT 技術は、大きなサイズを持つフォトニック素子のモデリングに適しております。</p> <ul style="list-style-type: none"> ● 封止構造設計 ● パッケージング ● LED ダイの配置 ● バックリフレクタ ● 大型表面散乱体 ● 蛍光体モデリングによるカラーチューニング <p>RT 技術の主な制限は、回折と干渉効果が重要であるサブ波長の幾何学的特徴をモデル化できないことです。</p>	<p>有限差分時間領域 (FDTD) や厳密結合波解析 (RCWA) などの電磁光学に基づく技術は、Maxwell 方程式を直接または何らかの近似によって解いています。これらの技術は、以下のような小さなサイズのフォトニック素子のモデリングに適しています。</p> <ul style="list-style-type: none"> ● サブ波長薄膜スタック ● 抽出効率を向上させるためのマイクロ/ナノ構造 ● フォトニック結晶やその他の周期的なグレーティング ● ランダムな表面テクスチャ ● 表面プラズモンモードとのカップリングによるバックリフレクター <p>これらの厳密な EM 技術の主な限界は、計算量の制限により、より大きな構造の解析が困難であることです。</p>

ソリューション: ミックスレベル・シミュレーションの手法

LED と OLED のシミュレーションには、電磁光学ベースと光線ベースのツールを統合し、それぞれの限界を回避するためのミックスレベルシミュレーション手法を使用する必要があります。さらに、この手法では、精度を確保するために、個々のツール間で完全なデータ転送が可能でなければなりません。

この論文で使用された個々のシミュレーションツールと対応する数値計算技術を以下に示します:

- ▶ RSoft™ FullWAVE™: FDTD ベースの厳密な電磁光学ツール。FDTD はマクスウェルのカール方程式の直接解であるため、任意の複雑な LED/OLED 構造のモデル化に使用できます。
- ▶ RSoft DiffractMOD™: RCWA ベースの電磁光学ツールで、周期構造を効率的にシミュレーションするために広く使用されています。
- ▶ RSoft LED Utility™: FullWAVE をベースとし、LED/OLED のインコヒーレントな光源のモデル化に使用されます。
- ▶ LightTools®: モンテカルロ・レイトレーシング技術を使用し、光源、レーザー、さまざまな光学素子で構成されるシステムからの出力を正確に予測することができます。
- ▶ BSDF (双方向散乱分布関数) ユーティリティ: DiffractMOD や FullWAVE をベースにしており、任意の構造物の表面からの散乱特性を評価するために使用します。
- ▶ RSoft BSDF User-Defined Optical Properties (UDOP) for LightTools: 表面に BSDF データを使用して、幾何光学的な近似値ではシミュレーションできない基本構造を偏光効果を含めて表現します。

我々のミックスレベルアプローチは、以下のように要約されます。

- ▶ 厳密な電磁波ベースのツール (FullWAVE や DiffractMOD) を使用して、サブ波長の層状 OLED 構造およびガラスと空気の界面の微細構造を特性評価する。これらのツールで計算された完全な散乱情報は、RSoft BSDF ファイルに保存されます。
- ▶ 計算された BSDF ファイルは、RSoft BSDF UDOP を使用して、レイベースツール (LightTools) の表面特性として適用されます。UDOP は、偏光効果や正確な角度分解能を含む完全なデータ転送を可能にします。

- ▶ 電磁光学シミュレータ(LED Utility)で計算されたガラス内のファーフールド分布を、LightTools で使用するために光線データソースに変換します。
- ▶ BSDF と光線データソースを使用して、LightTools は LED/OLED の全体的な性能をモデル化するために使用することができます。

ミックスレベルシミュレーションの詳細については、Bahl et.al [1, 2]を参照してください。

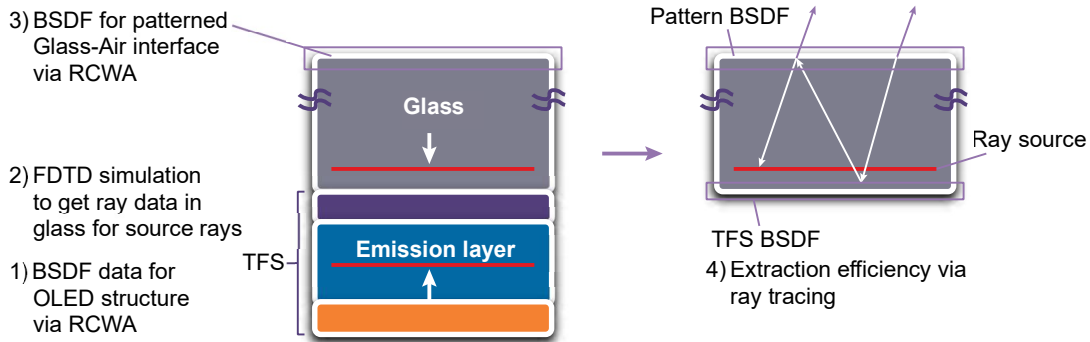


図 2: 電磁光学(DiffractMOD +FullWAVE)とレイトレーシングを組み合わせたシミュレーションの概念図
左側が簡略化された OLED 構造、右側がレイトレーシングに使用された構造

傍題: 従来の BSDF テクニックを超える RSoft BSDF/UDOP のアドバンテージ

電磁光学ツールと光線光学ツールをリンクさせるために使用される従来の BSDF アプローチと比較して、前述のアプローチにはいくつかの主要な利点があります。その主な利点のいくつかを以下に列挙し、詳しく説明します。

- ▶ シノプシスのミックスドレベル・アプローチは、偏光効果をネイティブに含んでいます。従来のアプローチでは、平均化によって偏光データが失われ、偏光に敏感な構造では正確ではありません。これは、ケーススタディ 3 で後述するように、偏光 LED を正確にシミュレートするために不可欠なものです。

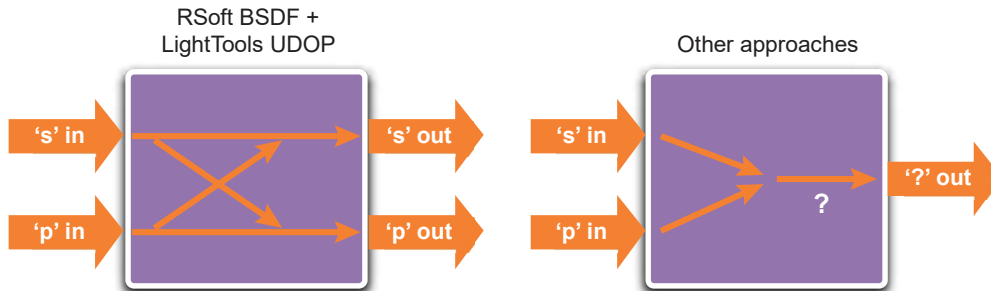


図 3: 偏光の処理方法: a) シノプシスのアプローチは偏光を保持し、クロスカップリングを含む、b) 他のアプローチでは偏光データが失われる。

- ▶ 回折次数の正確な角度分解能は RSoft BSDF に格納され、RSoft BSDF UDOP を通じて LightTools シミュレーションにネイティブに渡されます(図 4 参照)。従来のアプローチでは、角度グリッドにデータを保存するため、精度が低下します(図 4 の青線)。角度は「広がる」だけでなく「ずれる」こともあります。このトピックはケーススタディ 2 でさらに検討され、図 11 に描かれています。

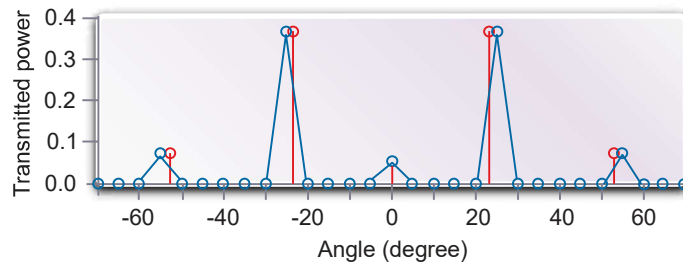


図 4: BSGF ファイルにおける回折散乱の角度データの保存方法
 a) シノプシスのアプローチでは回折角度を離散的な角度で保存(赤線)、
 b) 他のアプローチでは角度グリッドを使用(青線)、これは精度を低下させる

- ▶ RSoft BSGF UDOP は、あらゆる入力角度を使用します。「POI」角度は 0 度から 360 度まで変化します。必要に応じて対称性を仮定することも可能です。従来のアプローチでは、通常、「POI」角度を 0~90 度に制限し、常に対称性を仮定しています。

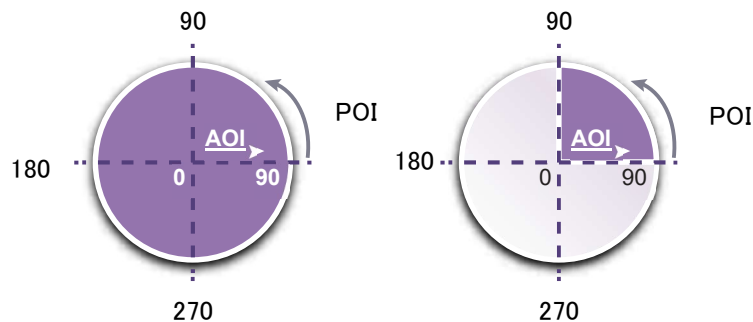


図 5: (a) RSoft UDOP では、(b) 従来のアプローチと異なり、完全な異方性角度依存性をモデル化することが可能です。

ケーススタディ1: シンプルな「フラット」OLED 構造

表面パターンニングによる抽出効率の向上を説明するために、まず、Adachi et.al. [3]に記載されていると同様の構造に基づく単純なボトムエミッション型緑色有機 EL を考えてみます。ここでは、陰極からの発光層 (EML) の相対位置 d を変化させ、最大のアウトカップリングを可能にする最適な位置を探します。この例で使用した構造と材料情報を図 6 に示します。

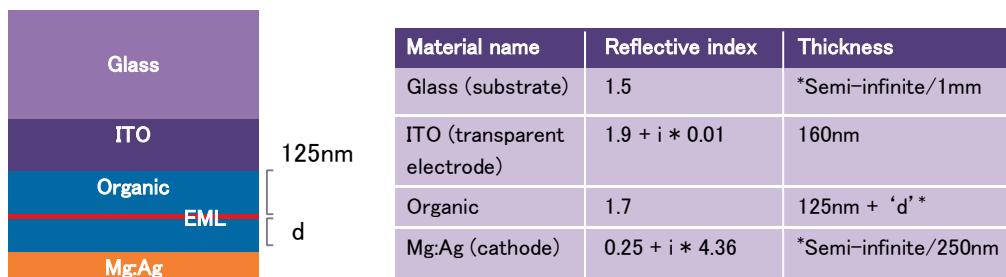


図 6: Adachi et.al. [3]に基づき、有機層の厚みを変化させた簡略化された OLED 構造。d はカソードと EML 間距離を表す

シミュレーションは以下のように行っています:

- ▶ すべてのシミュレーションは単色で、波長 520 nm です。
- ▶ EML は FullWAVE (FDTD) でインコヒーレント光源としてモデル化し、ファーフールドは LightTools で使用するために光源光線データファイルに変換されました。なお、厚さ 1mm の基板は、どの FDTD ツールでも扱えないほど大きいので、ファーフールドはガラス層内で測定されたものです。
- ▶ 薄層構造による散乱は、DiffraMOD で計算し、RSoft BSGF ファイルとして保存しました。

- ▶ 光線データソースと RSoft BSDL ファイル (RSoft BSDL UDOP 経由) を LightTools で使用して、デバイス全体のパフォーマンスをシミュレートしました。

図 7 はそのシミュレーション結果です。青線は FullWAVE 単独で得られたガラスへの抽出率、緑線は LightTools (FullWAVE と DiffractMOD のデータを含む) で得られた空気への抽出率です。また、Adachi et.al. [3] と Nowy (2010) [4] の結果も実線で示しています。FullWAVE シミュレーションの結果、ガラス基板への最大カップリングは 55% であり、カソード-EML 間距離 d が 100nm の場合に発生しました。しかし、空気中への最大結合はわずか 21% であり、これは d が 60~70nm の場合に起こりました。これは、光の 34% 近くがガラス基板に閉じ込められたままであることを示唆しており、FullWAVE だけではその大きな厚み (1mm) のためにモデル化することができません。

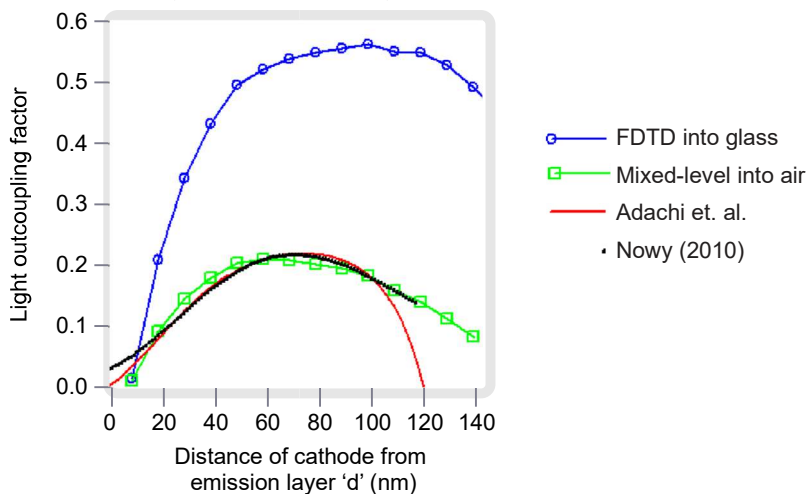


図 7: 開いた丸印は FullWAVE ベースの LED ユーティリティによるガラスへの光結合、開いた四角印はミックスレベルシミュレーションによる空気への光結合。実線は文献[3]のデータ、ドットは文献[4]の結果を表す。

全体として、LightTools、FullWAVE、および DiffractMOD を組み合わせた結果は、文献[3]とよく一致しています。最大アウトカップリングのための d の最適値を予測することも含まれています。この比較の詳細については、Bahl et.al. [2] を参照してください。

ケーススタディ2: モスアイ構造付き OLED

フラット OLED の事例から、全内部反射 (TIR) により、相当量の光がガラス基板内に閉じ込められていることが示唆されます。このアウトカップリングを改善するために、パターン化された基板、フォトニック結晶 (PC) グレーティング、表面テクスチャー、ランダムな体積散乱など、さまざまな設計が提案されています。これらはすべて、ミックスレベルシミュレーションの手法で解析することができます。この手法の例として、ガラスと空気の界面におけるモスアイのようなグレーティングパターンの解析について研究します。

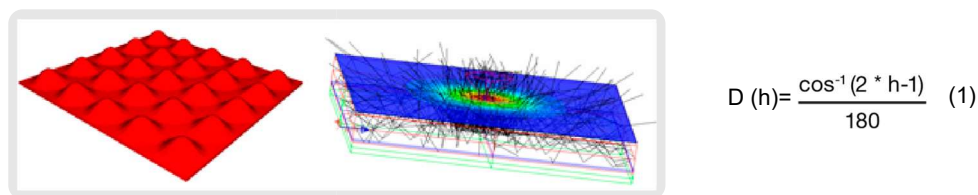


図 8: (a) ガラスと空気の界面からの抽出を強化するためのモスアイの回折格子パターン
(b) モンテカルロ光線追跡による典型的な結果

図 8 に、使用したモスアイ格子の特性を示します。周期 $3 \mu\text{m}$ 、高さ $1 \mu\text{m}$ 、立方格子タイプです。RSoft CAD Environment™ では、図 8 に示すように、任意の幾何学的形状を解析式で記述することができます。D と h はそれぞれ規格化された直径と高さです。構造体の底面で単位セルが接触するように、充填係数 1 を使用しました。パターンによる散乱を計算するために DiffractMOD を使用し、その結果を RSoft BSDL ファイルに保存しました。このファイルは、RSoft BSDL UDOP を使用して LightTools で空気-ガラス界面の表面特性を定義するために使用されました。

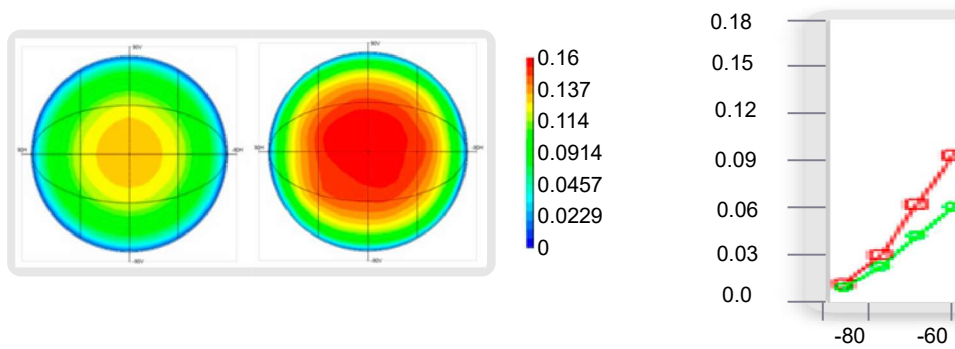


図 9: ミックスレベルシミュレーションを用いた空気中への光取り出し
(モスアイ格子がある場合(赤線)とない場合(緑線))

図 9 は、ガラスと空気の界面にモスアイのような格子パターンを適用した場合(赤線)と適用しない場合(緑線)のアウトカップリング結果を示しています。平面構造での最適なアウトカップリングは先に示したように 21%であったのに対し、パターンありでは 30%に増加し、アウトカップリング効率が 43%向上していることがわかる。

図 10 に、LightTools で計算した空気中のファーフィールド強度(モスアイグレーティングあり、なし両方)を示します。モスアイ格子があると、強度のピークが著しく高くなることがわかります。さらに、図 10c に示すように、モスアイ格子の存在によって、ファーフィールド強度分布の角度的な均一性も向上している。モスアイ格子のさらなる最適化により、さらなる向上が期待されます。

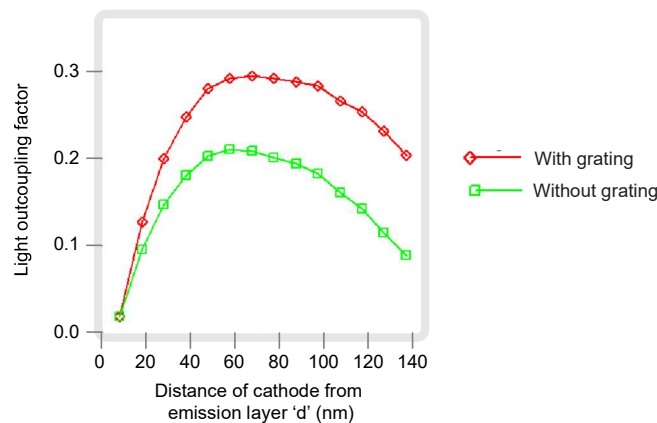


図 10: (a) フラットインターフェース構造と(b) モスアイグレーティングの計算された角度ファーフィールド強度。
(c) 水平角(H=0)におけるクロスカット。

BSDF ファイルの角度分解能の影響と RSoft BSDF UDOP を使用することの重要性を示す例を図 11 に示します。これは、モスアイのようなグレーティングパターンでパターン化されたガラスと空気のインターフェースで構成されています。入射光は角度の広がり大きな光源からなり、界面から一定の距離を離れた受信機でフィールドパターンを測定しています。

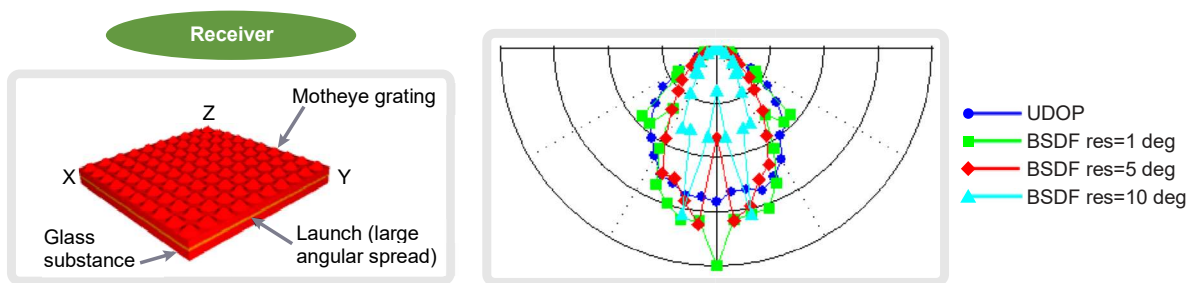


図 11: a) モスアイパターンのガラス-空気界面。b) 様々な出力角度分解能の BSDF に対する UDOP (青線)の受信機でのファールフィールドパターン

図 11 は、従来の測定による BSDF を用いた結果が出力角分解能に基づいて劇的に変化し、RSoft UDOP と同様の結果(出力分解能に依存しない)を得るには非常に細かい出力角分解能が必要であることを示しています。より細かい BSDF の出力解像度の要件は、より多くのメモリを必要とするだけでなく、大きなサイズのファイルを読み込む際に非効率になる可能性があります。

ケーススタディ3: 偏光 LED

最近の研究では、高効率バックライト LCD、プロジェクションディスプレイ照明、一般照明のコントラスト向上(グレア低減による)、センシング、通信など、偏光 LED の多くのアプリケーションを実証しています。前述のとおり、従来の方法では、平均化によって偏光データが失われるため、偏光に敏感な構造では正確ではありません。RSoft BSDF UDOP は、偏光 LED を正確にシミュレーションするために不可欠な偏光効果をネイティブに含むことができます。詳細については、Bahl et.al[1]を参照してください。

偏光 LED の構造の一例を M. Ma et.al [5]に基づく図 12 に示しています。これは、バックエミッション型 GaInN/GaN LED の基板-空気界面にワイヤグリッド偏光板(WGP)を使用したものです。WGP は、偏光に基づく光のフィルタリングに使用できるサブ波長の金属製グレーティングです。WGP から反射された光(主に非透過偏光)は、偏光変換・リサイクル機構により再利用することが可能です。

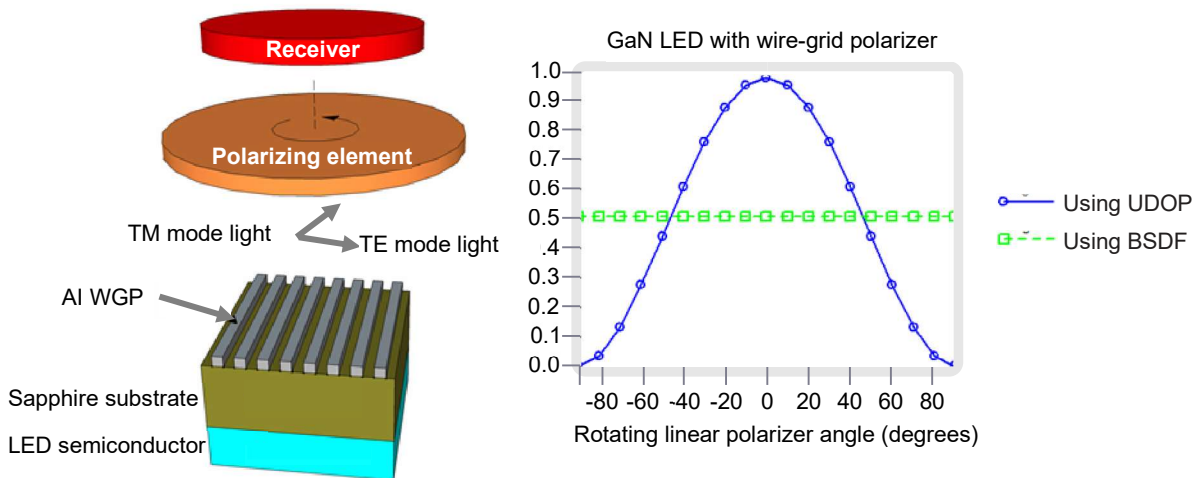


図 12: a) Al 系ワイヤグリッド偏光板を基板-空気界面に配置したバックエミッション型 GaInN/GaN LED

b) 2 つのアプローチによる LED から放射されるパワー RSoft UDOP(青線)および従来の BSDF(緑線)の 2 つのアプローチを用いた LED からの発光パワーを回転直線偏光板の配向角の関数として表したもの

波長 $0.46 \mu\text{m}$, 周期 $0.15 \mu\text{m}$, デューティサイクル 0.26, 深さ $0.19 \mu\text{m}$ の構造です。

$0.19 \mu\text{m}$, グレーティングと基板はそれぞれアルミニウムとサファイアです。この構造は DiffractMOD でシミュレーションされましたが、FullWAVE も使用可能でした。生成された BSDF は偏光データを含んでおり、LightTools で 2 種類の方法で使用されました:

- ▶ RSoft BSDF UDOP を直接使用する方法
- ▶ 他のアプローチを模倣するため、RSoft BSDF ファイルを LightTools BSDF に変換し、LightTools の測定 BSDF 表面特性として適用しました。

発光した光の偏光は、LED と検出器の間に回転する直線偏光板を配置して測定しました。2 つのアプローチによる結果を図 12b に示す。これらの結果から明らかなように、シノプシスのアプローチは偏光を含み、理論的に予想されるコサイン 2 乗依存性を示しています(また、参考文献の実験結果にもより近いです)。一方、他のアプローチは完全に非偏光発光を示しています。したがって、これらの他のアプローチは、偏光効果が重要な場合には LED に適していません。

まとめ

大きさのオーダーが異なる幾何学的特徴を含む最新の光学・フォトニックデザインでは、その設計を最適化し、性能を解析するために様々な数値計算技術が必要とされます。複数の技術(FullWAVE、DiffractMOD、LightTools)を組み合わせたミックスレベルシミュレーションの手法が発表されています。LED ユーティリティと共に使用される FullWAVE は、レイトレーシング用のインコヒーレントな光源の作成に使用され、DiffractMOD は、ガラスと空気の界面における薄型スタック OLED とモスアイ格子の両方の BSDF を生成するために使用されました。この情報は、光線データソースと表面特性インターフェイスを通じて LightTools シミュレーションに組み込まれ、デバイス性能の完全な解析が可能になりました。3 つのケーススタディにより、RSoft BSDF UDOP を使用することで、電磁光学ベースのツールと光線光学ベースのツール間で完全なデータ転送が可能となり、LED および OLED 構造の設計と最適化ができることが実証されました。さらに、偏光 LED のモデリングを含め、従来の BSDF アプローチに対する RSoft BSDF UDOP の利点も実証されました。

参考文献

- [1] Mayank Bahl; Gui-Rong Zhou; Evan Heller; William Cassarly; Mingming Jiang, et al. "Mixed-level optical simulations of light-emitting diodes based on a combination of rigorous electromagnetic solvers and Monte Carlo ray-tracing methods", Opt. Eng. 54(4), 045105 (Apr 21, 2015). ; <http://dx.doi.org/10.1117/1.OE.54.4.045105>.
- [2] Bahl, M., Zhou, G., Heller, E., Cassarly, W., Jiang, M., Scarmozzino, R., and Gregory, G.G, "Optical Simulations of Organic Light-Emitting Diodes through a Combination of Rigorous Electromagnetic Solvers and Monte Carlo Ray-Tracing Methods", Proc. SPIE, 9190 (2014).
- [3] Adachi, C., Baldo, M.A., Thompson, M.E, and Forrest, S.R., "Nearly 100% internal phosphorescence efficiency in an organic light emitting device," J. Appl. Phys. 90, 5048 (2001).
- [4] Nowy, S., "Understanding losses in OLEDs: optical device simulation and electrical characterization using impedance spectroscopy", Dissertation, 73 (2010).
- [5] Ma, M., Meyaard, D., Shan, Q., Cho, J., Schubert, E., Kim, G., and Sone, C., "Polarized light emission from GaInN light-emitting diodes embedded with subwavelength aluminum wire-grid polarizers," Applied Physics Letters 101, (2012).