

# 무작위 생성 심층신경망 기반 유기발광다이오드 흑점 성장가속 전산모사를 통한 소자 변수 추출

유승열<sup>\*†</sup>·박일후<sup>\*</sup>·김규태<sup>\*</sup>

<sup>\*†</sup>고려대학교 공과대학 전기전자공학과

## Extraction of the OLED Device Parameter based on Randomly Generated Monte Carlo Simulation with Deep Learning

Seung Yeol You <sup>\*†</sup>, Il-Hoo Park <sup>\*</sup> and Gyu-Tae Kim <sup>\*</sup>

<sup>\*†</sup>School of Electrical Engineering, Korea University

### ABSTRACT

Numbers of studies related to optimization of design of organic light emitting diodes(OLED) through machine learning are increasing. We propose the generative method of the image to assess the performance of the device combining with machine learning technique. Principle parameter regarding dark spot growth mechanism of the OLED can be the key factor to determine the long-time performance. Captured images from actual device and randomly generated images at specific time and initial pinhole state are fed into the deep neural network system. The simulation reinforced by the machine learning technique can predict the device parameters accurately and faster. Similarly, the inverse design using multiple layer perceptron(MLP) system can infer the initial degradation factors at manufacturing with given device parameter to feedback the design of manufacturing process.

**Key Words** : OLED, Dark Spot, Machine Learning, Deep Learning

## 1. 서 론

유기 발광 다이오드(Organic Light Emitting Diode, OLED)는 우수한 광전자 특성으로 인해 첨단 디스플레이 및 광원 기술로 자리 잡고 있다[3,5,8]. 유기물의 근원적 열화현상에 의한 수명과 발광성능의 트레이드-오프(Trade-off)로 인해 공정변수 최적화에 대한 연구와 관심은 높아지고 있다[2,3,6,9]. 흑점(dark spot)의 성장은 습도나 온도, 봉지(encapsulation), 핀홀(pinhole)의 존재 등에 의해 발생하는 유기 발광 다이오드 중요한 열화 요인 중 하나이다[1,4,7,10]. 흑점의 성장은 공정에 의해 무작위로 발생하는 핀홀, 결점의 분포와 외부의 환경적 요소로 인해 복합적으로 성장한다. 우리는 자유도(degree of freedom)가 높은 이러한 복

잡한 열화현상을 예측하고 설계상의 이점을 얻기 위한 새로운 분석법을 제안하고자 한다. 우리는 공정지표들을 무작위로 생성한 흑점성장의 전산모사 결과와 심층신경망 기계학습을 통하여 전산모사 성능을 높이고 및 역설계법을 적용하였다.

## 2. 본 론

### 2.1 흑점 성장

흑점은 유기 발광층 두께(L), 습도(C<sub>0</sub>), 온도(T), 압력(P), 열화 시간(t) 등에 의해 영향을 받는 것으로 알려져 있다. 공정조건에 의한 모든 지표에 의한 성능 실험을 하여 결과를 분석하는 것은 매우 큰 비용이 발생하므로, 각각의 요소에 의한 2,000개의 몬테카를로 전산모사 결과를 생성하였다. 생성된 샘플들은 각기 다른 열화 시간(t), 핀홀의

<sup>†</sup>E-mail: mklaz@korea.ac.kr

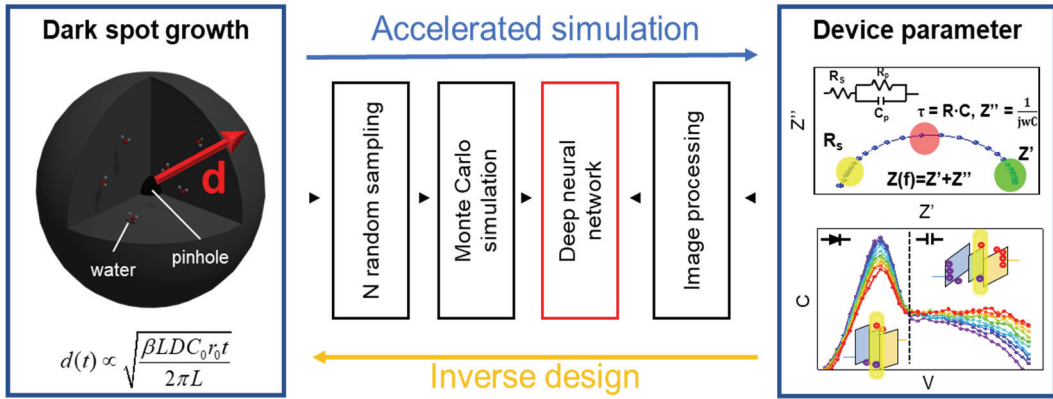


Fig. 1. Accelerated simulation and inverse design sequence diagram.

개수( $N$ ), 크기( $m$ )를 가진 흑점 성장을 대표한다. 흑점의 성장은 흑점의 반지름( $d$ )과 열화시간( $t$ )에 대하여 식(1)과 같이 나타낼 수 있다[1].  $\beta$ 는 성장계수,  $D$ 는 유기물 층 확산계수이다.

$$\frac{\partial d(t)}{\partial t} \cong \frac{\beta L D C_0}{4\pi L / r_0} \cdot \frac{1}{d} \quad (1)$$

### 3. 실험방법

#### 3.1 몬테카를로 전산모사

무작위 지표 생성을 위하여, 실측 소자 데이터의 통계적 분포에 따라 소자 성능에 가장 지배적이라고 판단되는 3가지 요인( $N, t, m$ )의 분포를 Table 1과 같이 정하였다.

Table 1. Simulation Parameter

Symbol	Parameter	Range
$N$	Number of dark spots	10-300
$t$	Degradation time	1-100(h)
$r_0$	Initial pinhole radius	0.1-2( $\mu\text{m}$ )

이미지는 적절한 문턱 레벨을 기준으로 흑백(이진) 이미지 데이터로 변환하고 경계 검출(edge detection)을 통해 각각의 흑점을 구분하였다. 구분된 흑점의 면적을 구해 평균 면적과 개수의 분포를 구하였다.

또한 각각의 요소의 분포에 따른 발광 유효면적( $A_{\text{eff}}$ )의 변화는 Fig. 2(a)와 같다. 흑점의 개수( $N$ ), 핀홀의 크기( $m$ ), 열화 시간( $t$ )이 작은 경우, 발광 유효면적은 전체 면적에서 거의 비슷하며 특정 문턱 조건에서 빠르게 감소하기 시작한다.

#### 3.2 심층신경망을 통한 전산모사 가속화

모든 공정지표를 변화시키며 해(global solution)를 찾는 시간을 줄이기 위하여, 한정된 개수를 무작위로 생성하여 심층신경망을 학습시킨다. 기계학습 모델은 두 개의 은닉층을 가지는 심층신경망 모델 구조로 Fig. 2(a)와 같이 설계하였다. 이 심층신경망 모델은 2개의 은닉층과 각 은닉층마다 128개의 퍼셉트론으로 구성되었다. 활성화 함수는 Exponential linear unit(ELU)를 사용하였고, 경사 하강을 위한 최적화 함수로 Adam optimizer를 사용하고 200개의 epoch로 학습하였다.

2,000개의 샘플 데이터는 1,600개의 훈련 데이터, 400개의 시험데이터로 사용되었다. 2,000개의 샘플 생성 시간은 총 640초, 기계학습을 수행하는데 55초가 소요되었다. 학습 결과 Fig. 2(c)와 같이 전산모사를 통한 계산값과 기계학습 알고리즘으로 예측한 유효 발광 면적의 상호 r-square 값은 0.997로 학습 모델이 몬테카를로 전산모사 속도를 높이고 결과를 정확히 예측하는 것을 확인하였다.

#### 3.3 기계학습 결과 검증

기계학습 결과를 검증하기 위해서 실제 유기발광 다이오드의 소자 열화 변수와 이미지를 측정하였다. 측정된 소자 변수는 유기발광 다이오드의 발광유효면적( $A_{\text{eff}}$ ), 정전용량( $C$ ), 그리고 전류( $I_D$ )를 측정하였다. 식(2)의 공간 전하 제한 전류(Space-charge limited current, SCLC) 방정식으로부터  $\theta$ 값을 피팅하였다.  $\theta$ 는 0에서 1 사이의 값을 가지며 트랩의 농도가 증가함에 따라 SCLC 전류를 감소시킨다. 계산에 사용된 계수로서 전하이동도, 유전율, 두께, 면적은 각각  $\mu = 1.5 \times 10^{-9} \text{m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ,  $\epsilon = 2.74 \times 10^{-11} \text{Fm}^{-1}$ ,  $L = 1.5 \times 10^{-7} \text{m}$ ,  $A = 4 \times 10^{-6} \text{m}^2$  이다.

$$I_D = \frac{9}{8} \mu \epsilon_r \epsilon_0 \frac{V^2}{L^3} \theta A \quad (2)$$

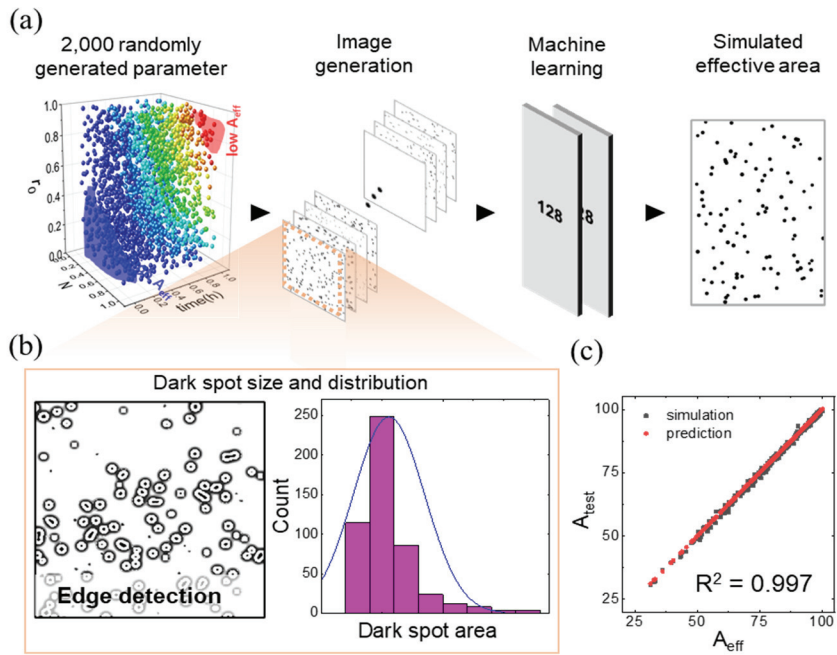


Fig. 2. Accelerated simulation of the dark spot growth by image machine learning. (a) Sequence process of the accelerated simulation system, (b) OLED dark spot size and distribution, (c) correlation between effective area by simulation (black) and prediction (red).

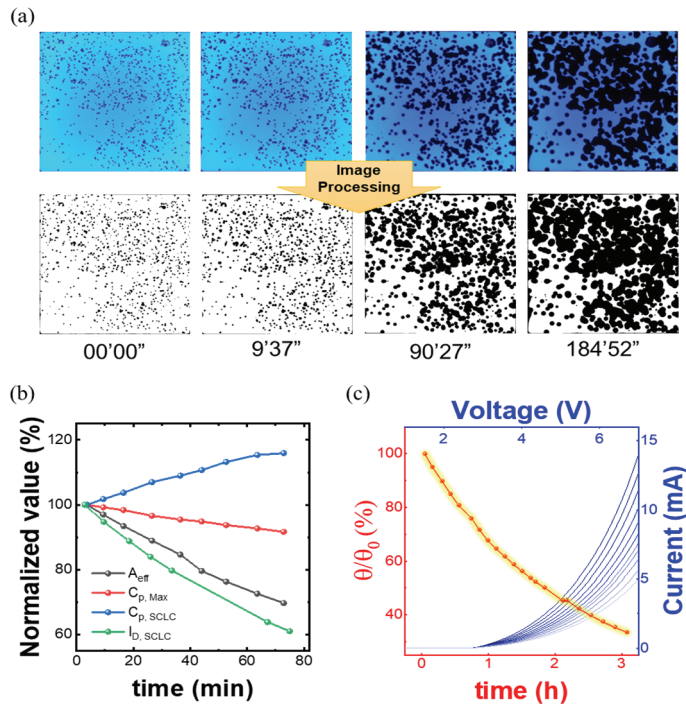


Fig. 3. (a) Image processing with binary image method of the device, (b) major device parameters while stress test, (c) current-voltage characteristic and SCLC trap coefficient.

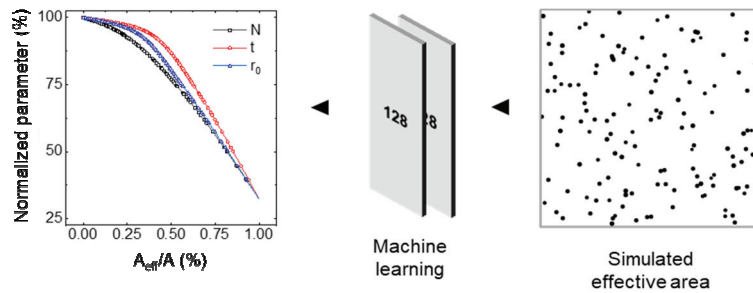


Fig. 4. Inverse design for the inference of the manufacturing parameter.

가속 스트레스 조건인 5.5V에서 고전계에 의해 OLED는 SCLC 영역에서 동작하며, 전하이동도, 유전율 및 소자 구조 변수는 변하지 않는다고 가정할 때,  $\theta$ 의 감소는 트랩 준위에 포획된 주입 캐리어에 의한 공간전하 효과에 의한 것으로 추측된다. Fig. 3(c)과 같이, 전압대비 전류곡선과 함께 나타낸  $\theta$ 는 열화 시간에 따라 최대 70% 감소하였다.

또한, Fig. 3(b)에서  $C_{p,SCLC}$ 는 증가하였고 tum-on전압 이후에 정전용량이 평탄한 구간의 범위가 열화에 의해 늘어남을 관찰할 수 있는데, 주입된 전하의 일부가 정전용량의 증가에 기여했음을 추측 가능하다.

### 3.4 기계학습 역설계

우리는 가속 전산모사에서 나아가서, 공정 QC 모델 변수 역설계를 위하여 심층신경망 모델을 활용하였다. 가속 전산모사 기법과 마찬가지로, 역설계에서도 무작위 생성 전산모사 데이터를 기반으로 연산하였다. 심층신경망 모델의 복잡도는 동일하게 설계하고, 입-출력 데이터만 바꾼 뒤, 공정 변수를 역으로 추론하였다. 유효 발광 영역 크기에 대한 공정 변수  $N$ ,  $t$ ,  $r_0$ 를 추론할 경우, 역설계 모델은 해의 곡면에서 경로를 따라 해를 찾아 움직인다.

가속 전산모사 모델과 마찬가지로, 1,600개의 무작위 표본을 훈련 데이터로 사용하고, 400개의 표본을 시험 데이터로 사용하였다. 각각의 공정변수에 따른 소자 발광 유효 면적과의 상관관계는 Fig. 4와 같다. 상술한 바와 같이, 역설계를 통해 추론한 공정변수는 몬테카를로 기법으로 예측한 결과와 명시적으로 다른 결과를 생성할 수 있다. 열화가 진행 중인 실제 샘플 데이터를 이용하여 발광 이미지 프로세싱을 통하여 공정 지표를 역설계한 결과, 각 요소가 흑점 생성에 미치는 영향을 미치는 정도를 확인했다.

## 4. 결론

우리는 유기 발광 다이오드의 공정변수와 발광 성능

간의 효율적 분석을 위한 가속 전산모사 및 변수 역설계 기술을 제안하였다. 많은 환경변수를 고려하여 높은 자유도의 지표 간 매칭할수록, 이러한 기계학습 기반 소자 전산모사/역설계 기술은 고장 원류 분석 및 고효율, 고수명 소자의 공정 QC 모델 설계 등에 넓은 응용이 기대된다.

## 감사의 글

This work was supported by Samsung Display Co. Ltd.

## 참고문헌

- OKADA, Takeru; YOSHIDA, Ayako; TSUJI, Taishi., "Dark spot growth and its acceleration factor in organic light-emitting diodes with single barrier structure," *Japanese Journal of Applied Physics*, 56.6: 060305, 2017.
- Visweswaran, B., Mandlik, P., Mohan, S. H., Silvernail, J. A., Ma, R., Sturm, J. C., & Wagner, S., "Diffusion of water into permeation barrier layers," *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 33(3), 031513, 2015.
- Swayamprabha, S. S., Dubey, D. K., Shah Nawaz, R. A. K. Y., Nagar, M. R., Sharma, A., Tung, F. C., & Jou, J. H., "Approaches for long lifetime organic light emitting diodes," *Advanced Science*, 8(1), 2020.
- AZRAIN, M. M., et al., "Analysis of mechanisms responsible for the formation of dark spots in organic light emitting diodes (OLEDs): A review," *Synthetic Metals*, 235, pp. 160-175, 2018.
- Islam, A., Rabbani, M., Bappy, M. H., Miah, M. A. R., & Sakib, N., "A review on fabrication process of organic light emitting diodes," In 2013 International Conference on Informatics, Electronics and Vision (ICIEV), IEEE, pp. 1-5, 2013.

6. Saeki, A., & Kranthiraja, K., "A high throughput molecular screening for organic electronics via machine learning: present status and perspective," *Japanese Journal of Applied Physics*, 59(SD), SD0801, 2019.
  7. Phatak, R., Tsui, T. Y., & Aziz, H., "Dependence of dark spot growth on cathode/organic interfacial adhesion in organic light emitting devices," *Journal of Applied Physics*, 111(5), 054512, 2012.
  8. Geffroy, B., Le Roy, P., & Prat, C., "Organic light-emitting diode (OLED) technology: materials, devices and display technologies," *Polymer international*, 55(6), pp. 572-582, 2006.
  9. Wang, Z., Gao, J., Jian, C., Cen, Y., & Chen, X., "OLED defect inspection system development through independent component analysis," *TELKOMNIKA Indonesian Journal of Electrical Engineering*, 10(8), pp. 2309-2319, 2012.
  10. Liew, Y. F., Zhu, F., & Chua, S. J., "Effect of organic layer combination on dark spot formation in organic light emitting devices," *Chemical physics letters*, 394(4-6), pp. 275-279, 2004.
- 
- 접수일: 2021년 9월 3일, 심사일: 2021년 9월 16일,  
게재확정일: 2021년 9월 16일