

OLED 박막 증착공정에서 유도로 내부의 분자유동 해석

성재용*, 이응기⁺

(논문접수일 2007. 9. 12, 심사완료일 2007. 11. 21)

Simulation of Molecular Flows Inside a Guide Block in the OLED Deposition Process

Jaeyong Sung*, Eungki Lee⁺

Abstract

Molecular flows inside a guide block in the OLED(organic luminescent emitting device) deposition process have been simulated using DSMC(direct simulation Monte Carlo) method. Because the organic materials are evaporated under vacuum, molecules flow at a high Knudsen number of the free molecular regime, where the continuum mechanics is not valid. A guide block is designed as a part of the linear cell source to transport the evaporated materials to a deposition chamber. When solving the flows, the inlet boundary condition is proved to affect significantly the whole flow pattern. Thus, it is proposed that the pressure should be specified at the inlet. From the analysis of the density distributions at the nozzle exit of the guide block, it is shown that the longer nozzle can emit molecules more straightly. Finally, a nondimensionalized mass flow profile is obtained by numerical experiments, where various nozzle widths and inlet pressures are tested.

Key Words : OLED(Organic Luminescent Emitting Device), DSMC(Direct Simulation Monte Carlo), 분자유동(Molecular Flow), 유도로(Guide Block), 선형 증발원(Linear Cell Source), 자유분자영역(Free Molecular Regime)

1. 서론

최근 정보화 사회로의 움직임이 더욱 가속화되고 있으며 이에 따라 IMT-2000 등 문자, 음성, 화상 정보를 시간과 장

소의 제약 없이 주고받을 수 있는 정보 디스플레이의 중요성이 점점 증대하고 있다. 이러한 요구에 부응하여 정보디스플레이는 CRT로부터 평판 디스플레이(FPD, Flat Panel Display)로 점차 옮겨가는 추세이다. 그 중 각광 받는 것이

* 서울산업대학교 기계공학과 (jysung@snut.ac.kr)

주소: 139-743 서울시 노원구 공릉2동 172

+ 공주대학교 기계자동차공학부

액정표시장치(LCD, Liquid Crystal Display)를 대체할 차세대 평판정보표시장치로서 OLED(Organic Luminescent Emitting Device) 디스플레이이다. OLED는 투명전극(양극)이 입혀져 있는 유리 기판과 금속의 음극 사이에 유기 발광 재료, 정공과 전자 등의 전하 운반자의 주입 및 수송을 촉진하기 위한 층으로 구성되어 있다. 이러한 다층의 유기물 박막에 음극과 양극을 통하여 주입된 전자와 정공이 여기자를 형성하고, 형성된 여기자로부터 특정한 파장의 빛이 발생하는 현상을 이용하는 것으로 저전압 구동, 광시야각, 빠른 응답 속도, 공정의 단순화가 가능하며, 배면 광원(Back-Light)이 필요 없기 때문에 경량 박형으로의 개발이 용이한 장점 등을 가지고 있다.

대면적용 OLED의 증착공정에서는 점 증발원(Point Cell Source)이 아닌 선형 증발원(Linear Cell Source)방식이 필요하다. 선형 증발원은 기판과 증발원의 거리를 근접시킬 수 있는 구조로 재료 소모량을 감소시킬 수 있는 장점을 가지고 있고, 증착기의 크기를 보다 소형화할 수 있어 증착기의 설치 공간을 적게 차지하는 등의 이점을 기대할 수 있다. 단점은 성막 두께의 제어 및 막두께의 균일도 확보가 어려우며 증발원 전역의 온도 균일화가 핵심 기술이다. 이러한 단점을 극복하기 위해서는 유기재료의 이동 경로인 유도로(Guide Way) 내부 및 노즐부의 유동현상에 대한 체계적인 해석이 필요하다.

일반적으로 기체유동은 누센수(Knudsen Number)에 따라 유동특성이 약간씩 달라지는데, 누센수가 0.01보다 작으면 연속체 가정이 성립하는 일반적인 유동이고, 누센수가 0.01~0.1 이면 미끄럼유동 영역(Slip-Flow Regime), 0.1~3 이면 천이영역(Transition Regime), 3 이상이면 자유분자영역(Free Molecular Regime)으로 구분된다. 유기재료의 증착 공정은 10^{-4} Pa의 고진공 상태에서 이루어지므로 분자의 평균 자유행로(Mean Free Path)가 매우 길어 자유분자영역에 해당된다. 따라서 기존의 연속체 가정에 근거한 Navier-Stokes 방정식이 성립하지 않는다. 이러한 높은 누센수 영역에서의 유동을 모사하기 위해서는 분자운동 이론에 근거한 새로운 지배방정식인 Boltzmann 방정식을 풀어야 하나 이 방정식은 직접 푸는 것은 매우 어려우므로 유동을 미시적 관점에서 물리적으로 직접 모사하는 확률적 방법인 직접모사 몬테카를로기법(DSMC, Direct Simulation Monte Carlo)을 적용하는 것이 가장 적합하다.

DSMC는 1960년대에 Bird⁽¹⁾에 의해 처음 제안되어 지금까지도 계속 개선되어지고 있다. 후에 Nanbu⁽²⁾에 의해 DSMC 방법의 해를 Boltzmann 방정식의 근사해로 볼 수 있음이

밝혀졌다. Piekos & Breuer⁽³⁾는 저속 유동에서 기존의 속도 경계조건에 대한 문제점을 지적하고 압력경계조건을 사용하여 미끄럼유동 영역 및 천이 영역에서의 유동특성을 논의하였다. Nance 등⁽⁴⁾도 저속 유동에서는 적용가능한 압력경계조건을 제안하였다. DSMC 해석기법은 주로 희박기체 영역에서 많이 적용되어 왔으며⁽⁵⁻⁷⁾, 최근에는 MEMS 분야에도 응용되고 있다⁽⁸⁻¹⁰⁾.

본 연구에서는 선형 증발원 방식의 대면적용 OLED 증착기를 개발함에 있어 유도로 내부의 분자유동을 DSMC 방법으로 시뮬레이션하고 유도로의 노즐에서 방사되는 유기재료의 방사특성을 고찰하고자 한다. 이를 위해서 2차원 수치해석 기법을 개발하고 경계조건에 따른 유도로 내부 유동의 변화를 고찰함으로써 물리적으로 합리적인 경계조건을 찾는다. 노즐의 길이가 서로 다른 두 유도로에 대하여 각각 수치해석을 수행하여 노즐 길이가 방사특성에 미치는 영향을 논의한다. 최종적으로 노즐의 폭과 증발원 압력의 변화에 따른 노즐 방사 특성을 해석하고 방사되는 분자의 질량유량 분포 형태에 대해 고찰한다.

2. 수치해석 기법

DSMC에서 사용되는 가정은 기체가 매우 희박(Dilute)하다는 조건으로 기체분자간의 거리가 분자 직경의 10배 이상이면 적용이 가능하다. 이를 바꾸어 말하면 충분히 작은 계산시간 간격 하에서 분자의 움직임과 분자간의 충돌을 서로 분리시켜 생각할 수 있다는 것이다. 또한 DSMC에서는 기체유동을 모사하기 위해 실제 유동의 많은 입자를 대표하는 모사입자 수십만 또는 수백만 개를 이용한다. 각 시간간격에 대하여 주어진 모사입자의 위치와 속도를 추적해 가는데, 이 과정에서 분자 개개의 상호작용들을 난수로 표현하여 확률적인 거동을 모사하게 된다.

해석을 위한 기체-경계면 상호작용 모델(Gas-Surface Interaction Model)은 일반적으로 가장 많이 사용하는 난반사(Diffuse) 모델을 사용하였다. 또한 분자의 충돌을 위해서는 분자에 대한 통계적 모델이 필요한데, 본 연구에서는 가변강구(VHS, Variable Hard Sphere) 모델을 바탕으로 한 비탄성충돌모델(Inelastic Collision Model)을 채택하였다. 비탄성충돌모델에서는 전체에너지는 변함없지만 회전, 병진, 진동 모드와 같은 모드간의 에너지 교환을 허용한다.

Fig. 1에서는 본 연구에서 사용된 유도로 형상에 대한 격자계를 나타낸다. 전체적으로 사각형 격자인 HEXA 격자 구조를 가지고 있으며, 계산에 사용된 Node 수는 2835개,

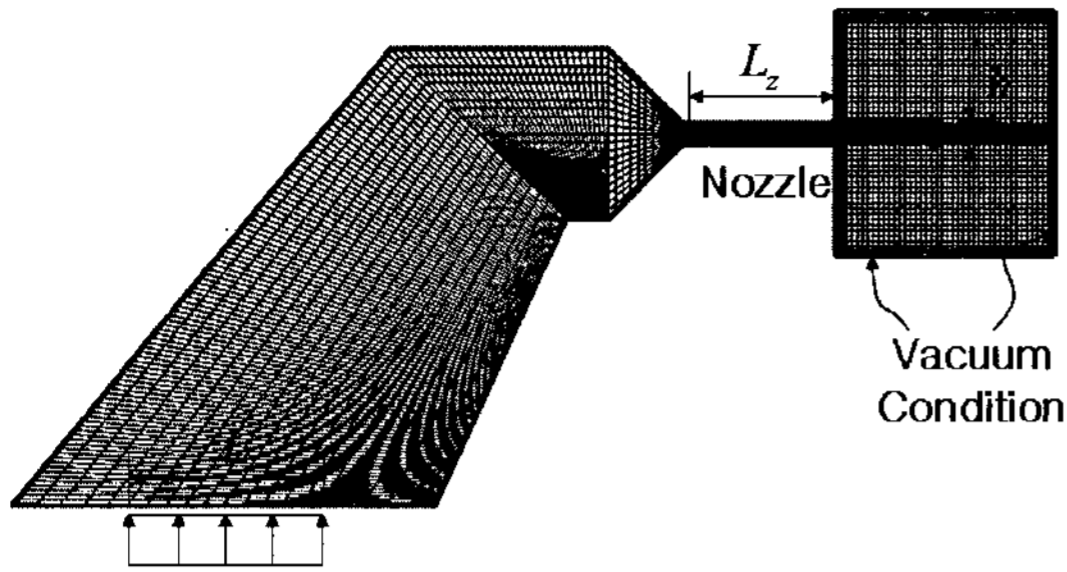


Fig. 1 Geometry of the guide block and mesh generation

Element 수는 2680개이다. 유도로는 대면적 유기박막공정을 수행하기 위한 선형 증발원 역할을 하는 것으로 노즐부에서 얼마나 균일한 분자류가 분사되는지를 해석하는 것이 중요한 설계인자이다. 본 연구에서는 노즐부의 방사특성을 위하여 노즐 출구 부분에 격자를 설정하여 방사되는 분자류 거동을 파악하고자 하였다. 입구, 출구와 같은 유동경계에서는 분자의 물리적 상태를 잘 반영할 수 있는 조건이 주어지야 하며, 일반적으로 유동장의 속도가 분자의 열속력보다 큰 경우 입, 출구에서 속도를 지정하는 방식을 적용해 왔다. 그러나 실제 문제에서 분자들의 평균 유속을 예측하기 힘든 경우가 많다. 반면 압력은 상대적으로 측정이 용이하므로 입, 출구의 압력을 지정하는 방식도 사용된다. 본 연구에서는 유도로의 입구부는 속도 경계조건과 압력 경계조건을 모두 적용하여 비교하였으며, 노즐의 출구부는 압력을 0으로 두어 진공 경계조건을 사용하였다. 속도 경계조건에서는 경계에서 주어진 온도에 의해 분자들의 최빈열속력(Most Probable Molecular Thermal Velocity)을 구하고, 이에 상응하는 Maxwell 분포 함수에 지정된 평균 속도를 더한 값으로 유입되도록 한다. 압력 경계조건은 Piekos & Breuer⁽³⁾가 제안한 방식을 사용하였으며, 이 방법에서는 주어진 압력에 의해 수밀도(Number Density)를 계산하여 이로부터 새롭게 유입되는 분자의 수를 결정한다. 이때, 분자들의 평균속도가 필요한데, 이는 경계면에 바로 인접한 셀 내부에 있는 분자들의 평균속도를 사용한다. 즉, 매 시간진행마다 경계면에 있는 셀 내부 분자들의 평균속도를 구하고 이를 다음 단계에서의 평균속도로 지정한다.

Fig. 1의 형상에서 입구부의 크기 L은 33.8mm 이며, 노즐의 길이 Lz는 7, 15mm의 두 경우를 해석하였다. 또한 노즐의 폭 h는 2, 4, 8mm의 세 가지를 적용하였다. 해석에 사용된 분자는 물성치가 비교적 잘 알려진 질소 분자를 사용하였으며, 질소분자는 질량 m이 46.5×10^{-10} kg, 지름 d가

Table 1 Flow parameters

Parameters	Equations	Values
Number density	$n = \frac{p}{kT}$	$1.26 \times 10^6 (\#/m^3)$
Density	$\rho = nm$	$5.86 \times 10^{-10} (kg/m^3)$
Molecular spacing	$\delta = n^{-1/3}$	$4.23 \times 10^{-6} (m)$
Mean free path	$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \pi d^2 n}$	102.73(m)
Knudsen number	$Kn = \frac{\lambda}{L}$	3039
Reynolds number	$Re = \frac{\rho UL}{\mu}$	1.2×10^{-3}

Boltzmann constant $k = 1.380622 \times 10^{-23}$

4.17×10^{-10} m, 점도(Viscosity) μ 가 1.656×10^{-5} Ns/m²로 주어져 있다. 유도로 입구에서의 압력 p는 10^{-4} Pa, 온도 T는 유도로 벽면의 온도와 동일하게 573 K로 설정하였으며, 유입되는 분자의 속도 U는 1000m/s로 가정하였다. 이 때 질소 분자의 상태는 Table 1과 같다. 이와 같은 조건에서 유도로 내에 존재하는 분자 수는 약 4.0×10^{13} 개 이다. 비록 압력이 매우 낮은 고진공 상태이라 할지라도 내부에 존재하는 실제 분자를 모두 해석하기에는 컴퓨터용량 및 계산시간으로 인해 한계가 많다. 따라서 DSMC에서는 수많은 실제분자를 대표하는 대표분자들을 이용하여 분자유동을 모사한다. 본 계산에서는 1개의 대표분자가 2.0×10^9 개의 실제분자를 대표하도록 설정하였으며, 유동해석을 위해 사용된 총 대표분자 개수는 약 2만개 정도가 된다. 분자유동은 기본적으로 비정상(Unsteady) 유동이므로 시간에 따른 유동변화를 관찰하게 된다. 본 계산에서는 시간증분을 2.0×10^{-7} s로 설정하여 해석을 수행하였다. 본 연구에서 사용된 수치해석 기법에 대한 검증은 이전연구⁽¹⁰⁾에서 고찰한 바 있어 본 연구에서는 생략하였다.

3. 결과 및 고찰

3.1 입구 조건에 따른 영향

증발기에서 증발된 유기 분자가 유도로 내부로 들어올 때의 속도분포가 어떻게 될 것인가에 대해서 정확하게 예측하기 어렵다. 가장 쉽게 접근할 수 있는 방법은 주어진 질량유량에 의해 균일한 입구속도 분포를 가지고 분자가 유도로

내부로 유입된다고 가정하는 것이다. 또 하나는 증발기에서 증발된 분자가 일정 압력에 도달하면 유도로 내부로 입사되어 노즐로 토출된다고 가정하는 것이다. 본 연구에서는 입구 조건을 균일 속도분포와 압력경계조건을 사용하여 그에 따른 영향을 비교하였다.

Fig. 2는 두 가지 입구 조건에 대하여 계산된 유도로 내부

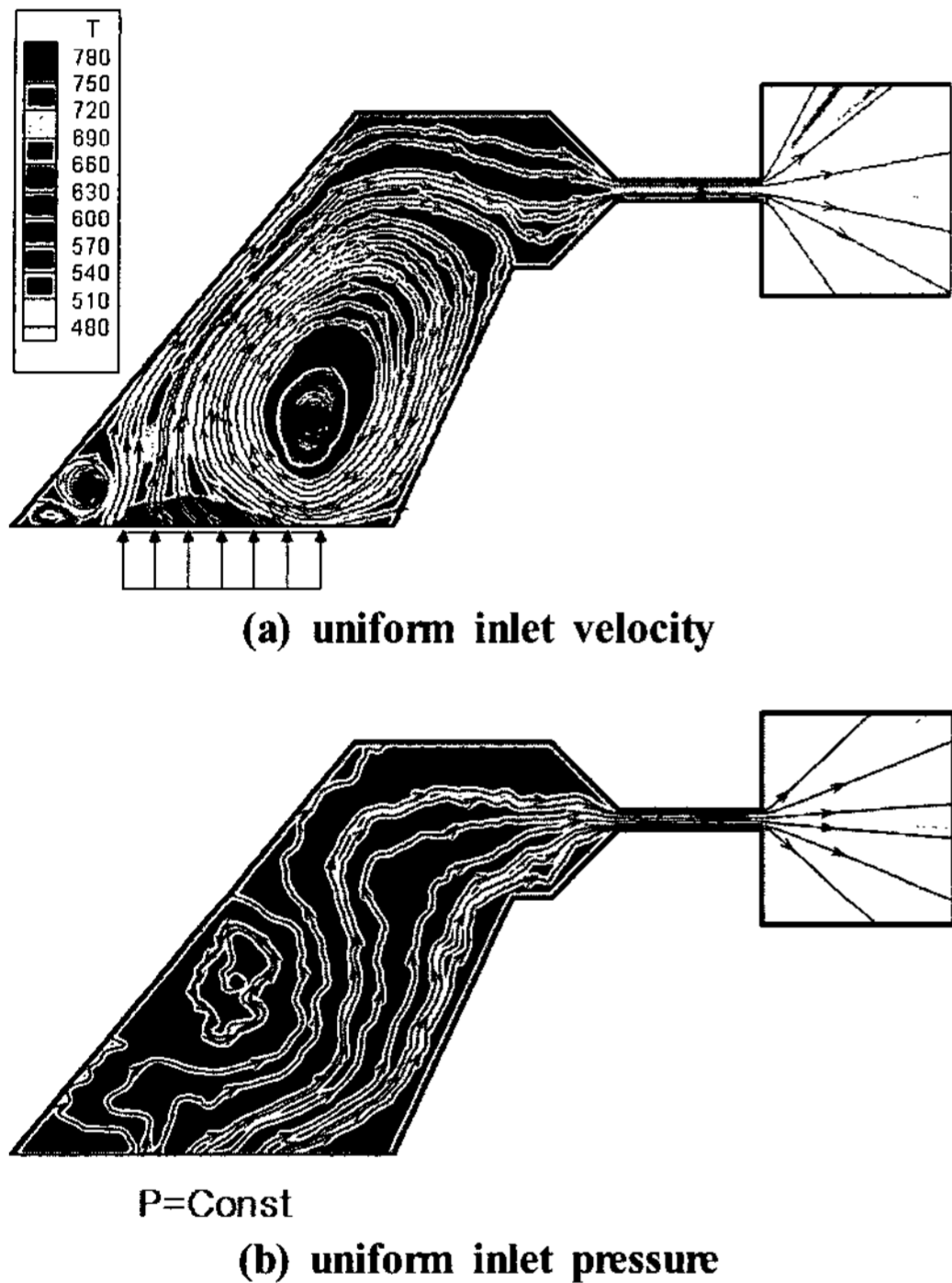


Fig. 2 Streamlines and temperature distributions for the two inlet conditions

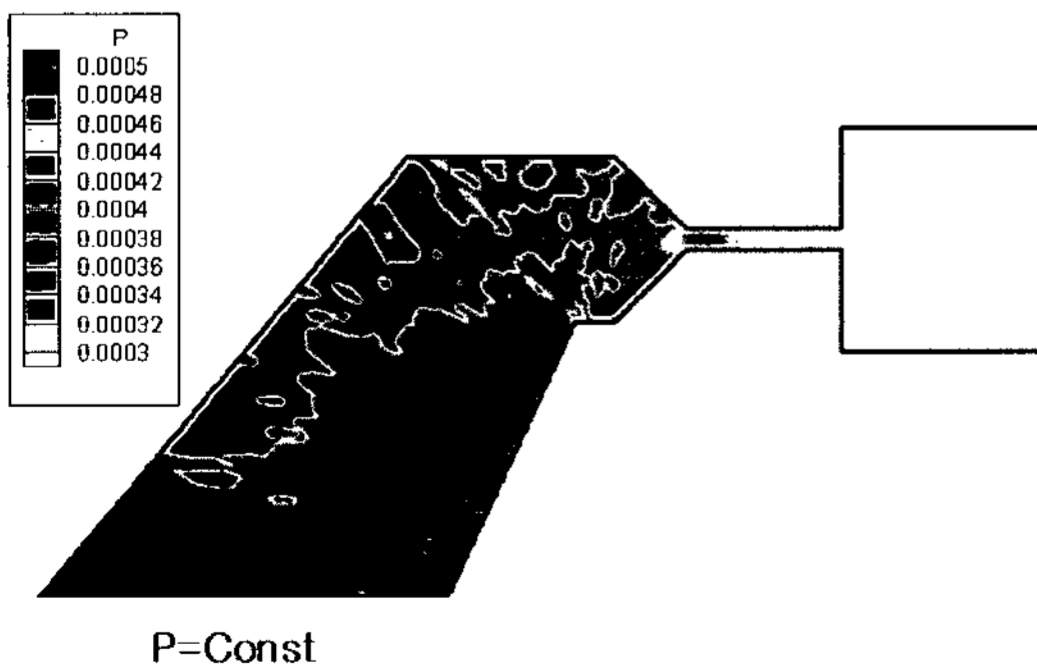


Fig. 3 Pressure distribution under the uniform inlet pressure condition

유선(Streamline)과 온도장의 분포를 나타낸다. 균일 입구속도에서는 유도로 내부에서 시계방향으로 회전하는 강한 와류를 볼 수 있으나 압력 경계조건에서는 유도로 왼쪽에 반시계방향의 약한 와류가 존재하나 전체적으로 유동이 유도를 따라 이동하는 현상을 볼 수 있다. 온도장의 경우 균일 입구속도 조건에서는 유도로 내부의 정체된 분자들과 입구에서 유입되는 분자들이 충돌하면서 입구 근처에서 온도가 급격히 상승하여 최대 780 K 까지 올라간다. 반면 압력 경계조건에서는 전체적으로 유도로 벽면 온도인 573 K 근처의 온도를 유지하고 있다. 따라서 입구 조건의 선택에 따라 유도로 내부의 유동 현상은 매우 상이한 결과를 나타냄을 확인할 수 있다. 실제 OLED 증착 장비에서 유도로 내부 온도가 급격히 상승하는 현상은 관찰되지 않았으며, 속도분포가 입구셀과 내부셀의 압력차에 의해 자동으로 결정되는 압력 경계조건을 적용함이 타당하다는 결론을 얻었다. Fig. 3에서는 압력 경계조건을 사용하였을 때 유도로 내부의 압력 분포를 나타내었다. 유도로 내부로 유입된 분자가 매우 좁은 노즐을 통해 분사되기 때문에 유도로 내부에서 분자들이 정체되어 높은 압력을 유지하고 있으나 노즐을 지나면서 압력이 급격히 감소한다. 이는 노즐 출구에서 분자들이 진공 챔버로 토출되면서 속도가 급격히 증가하는 현상과 관련되어 있다.

3.2 노즐의 방사 특성

증착공정에서 중요한 것은 노즐 끝에서 방사되는 분자류 특성이며, Fig. 4에서 노즐 출구에서의 속도분포를 자세히 고찰하였다. 이 그림에서 보는 바와 같이 노즐에서 방사된 분자는 모든 방향으로 고르게 퍼져나감을 볼 수 있다. 이 때 퍼져나가는 분자의 속도는 거의 일정하게 나타난다. 노즐부의 유동특성은 유도로 내에 정체되어 있던 분자들이 노즐을

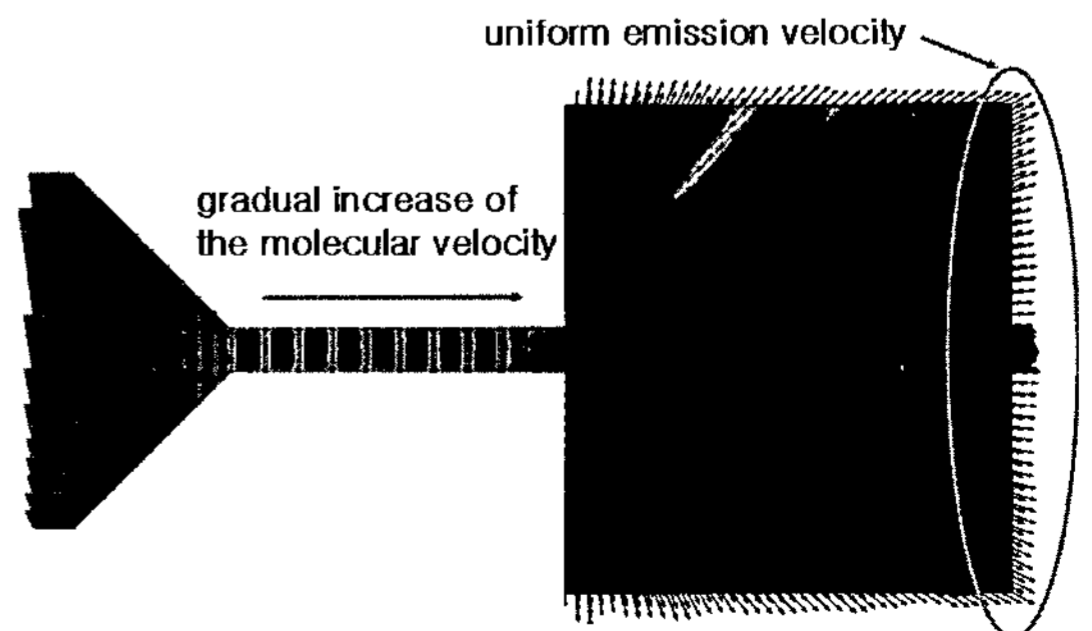
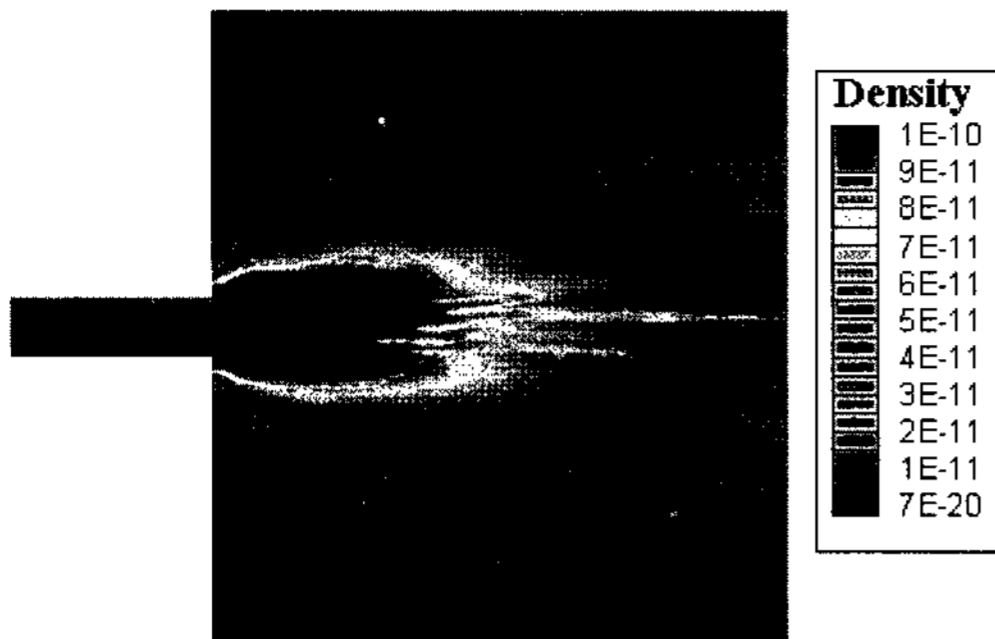
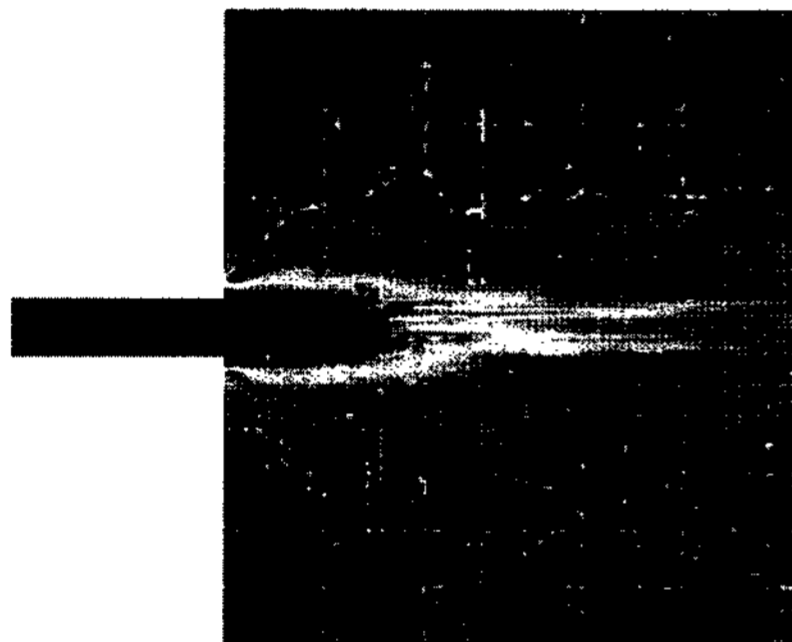


Fig. 4 Velocity field by the molecular emission at the nozzle exit



(a) Short nozzle, $L_z = 7\text{mm}$



(b) Long nozzle, $L_z = 15\text{mm}$

Fig. 5 Comparison of the density distributions at the exits of the short and long nozzles

통과하면서 점점 속도가 증가하고, 노즐 출구에서 높이 방향으로 균일한 속도분포를 가지고 있는 것으로 요약될 수 있다. 방사 특성에 있어 질량유량이 박막의 증착두께에 가장 직접적으로 영향을 미치므로 이를 고찰할 필요가 있다. 질량유량은 단면적이 같다면 밀도와 속도값에 의존한다. 노즐에서 방사된 분자는 속도가 거의 일정하므로 Fig. 5와 같이 밀도분포를 비교함으로써 질량유량의 특성을 평가할 수 있다. 이 그림에서는 서로 다른 길이를 가진 노즐에 대하여 밀도분포 특성을 비교하였다. 그 결과, 노즐 길이가 길면 밀도가 중앙에 보다 집중되어 나타남을 볼 수 있다. 따라서 전체적으로 긴 노즐에서 방사 시 중앙 집중도가 좋은 것으로 평가된다. 그 이유는 노즐의 길이가 증가함으로써 주유동 방향으로의 분자운동 관성을 증가시켰기 때문으로 해석된다.

노즐에서 방사되는 분자류의 질량유량 분포 특성을 살펴보기 위하여 긴 노즐에 대하여 노즐의 폭 h 와 입구압력을 변화시키면서 그 경향을 분석하였다. 노즐부에서 방사되는 폭을 $h=2, 4, 8\text{mm}$ 로 2배씩 증가시켰고, 유도로 입구의 압력을 $P=10^{-4}, 10^{-3}\text{Pa}$ 로 설정하여 계산하였다. 이와 같이 총 6

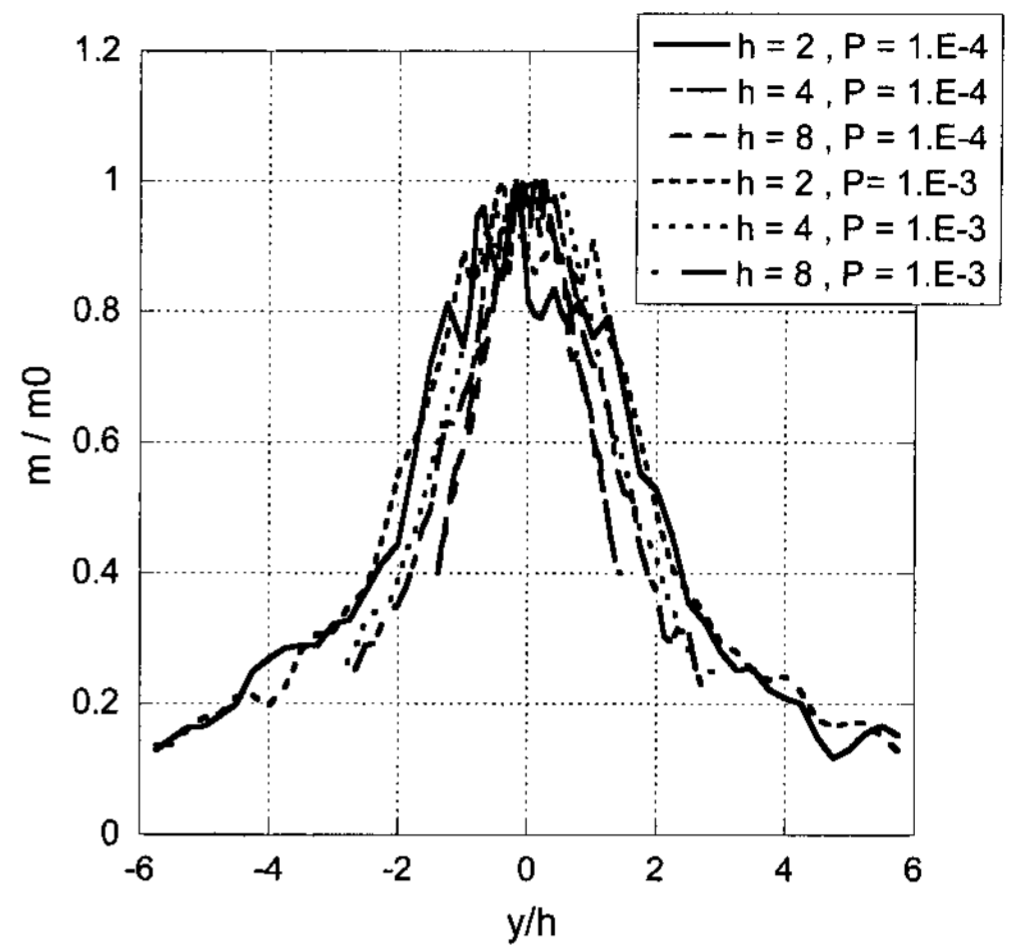


Fig. 6 Nondimensionalized mass flow curve for various nozzle sizes

가지의 경우에 대하여 테스트 하였으며, 계산결과 동일한 크기의 노즐에 대하여 재료사용량(질량유량)은 입구압력의 크기에 비례적으로 증가한다. 즉, 입구압력이 10배 높아지면 재료사용량도 10배 많아진다고 할 수 있다. 바꾸어 말하면, 재료사용량을 10배 증가시키면 증발기 내부의 압력이 10배 증가하여 유도로 입구에 작용하는 압력도 10배 증가한다. 또한 동일한 입구압력에 대하여 노즐 폭이 2배 증가하면 질량유량이 약 2.5배정도 증가하는 것으로 나타났다. 노즐 폭이 증가하면 유도로 내부의 저항이 훨씬 더 감소하여 보다 많은 질량유량을 보내는 것으로 파악된다.

노즐에서 방사되는 분자류의 질량유량 분포곡선을 노즐 출구에서 20mm 떨어진 수직면에서 계산하여 Fig. 6에 나타내었다. 이 그림에서 질량유량 m 은 최대값 m_0 로 무차원화하였으며, 노즐 폭의 크기에 의한 영향을 배제하기 위해서 좌표축을 노즐 폭 h 로 무차원화 하였다. Fig. 6의 무차원화된 질량유량 분포곡선은 노즐 폭과 총 질량유량을 변화시키더라도 그 분포형태는 유도로의 형상이 동일하면 동일한 형태의 곡선으로 나타남을 알 수 있다. 따라서 이 무차원화된 질량유량 특성곡선은 노즐을 포함한 유도로 전체를 하나의 증발원으로 간주하였을 때, 증발원에서 나오는 분자류의 일반화된 분포곡선으로 활용할 수 있다.

4. 결론

고진공 상태에서의 분자류 유동을 해석하기 위한 2차원

DSMC 코드를 개발하였고, 개발된 코드를 OLED 증착공정에 사용되는 유도로 내부의 유동특성 해석을 수행하였다. 유도로 내부 분자유동은 입구 경계조건에 따라 매우 다른 형태를 가지고 있으며, 본 연구에서는 속도를 지정하는 것보다 압력 경계조건을 사용하는 것이 실제현상과 매우 가까운 것으로 판단하였다. 노즐에서 분사되는 분자류의 방사특성 해석을 수행한 결과 노즐의 길이가 길어짐으로 해서 분자류의 밀도가 중앙에 집중되는 효과가 있음을 확인하였다. 입구압력과 노즐 폭의 변화에 따른 수치실험을 통하여 무차원화된 방사특성 곡선을 제안함으로써 유도로 전체를 하나의 셀 소스로 가정할 수 있고, 증착기 챔버 설계를 효과적으로 할 수 있도록 하였다.

후 기

본 논문은 서울특별시 지원하는 전략산업 혁신클러스터 육성 지원사업(3D Microsystem Packaging을 위한 접합 공정 및 장비개발)으로 지원되어 수행하였습니다.

참 고 문 헌

- (1) Bird, G. A., 1994, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas flows*, Oxford University Press, New York.
- (2) Nabu, K., 1980, "Direct Simulation Scheme Derived from the Boltzmann Equation," *Journal of Physical Society in Japan*, Vol. 49, pp. 2042~2058.
- (3) Piekos, E. S. and Breuer, K. S., 1996, "Numerical Modeling of Micromechanical Devices Using the Direct Simulation Monte Carlo Method," *Journal of Fluids Engineering*, Vol. 118, pp. 464~469.
- (4) Nance, R. P., Hash, D. B., and Hassan, H. A., 1998, "Role of Boundary Conditions in Monte Carlo Simulation of Microelectromechanical Systems," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 12, No. 3, pp. 447~449.
- (5) Hermina, W. L., 1989, "Monte Carlo Simulation of Rarefied Flow Along a Flat Plate," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 3, No. 1, pp. 7~12.
- (6) Wilmoth, R. G., 1992, "Application of a Parallel Direct Simulation Monte Carlo Method to Hypersonic Rarefied Flows," *AIAA Journal*, Vol. 30, No. 10, pp. 2447~2452.
- (7) Yan, F. and Farouk, B., 2002, "Computations of Low Pressure Fluid Flow and Heat Transfer in Ducts Using the Direct Simulation Monte Carlo Method," *Journal of Heat Transfer*, Vol. 124, pp. 609~616.
- (8) Xue, H., Fan, Q., and Shu, C., 2000, "Prediction of Micro-Channel Flows Using Direct Simulation Monte Carlo," *Probabilistic Engineering Mechanics*, Vol. 15, pp. 213~219.
- (9) Aktas, O., Aluru, N. R., and Ravaioli, U., 2001, "Application of a Parallel DSMC Technique to Predict Flow Characteristics in Microfluidic Filters," *Journal of Microelectromechanical Systems*, Vol. 10, No. 4, pp. 538~549.
- (10) Sung, J., Ahn, Y., Lee, S., and Lee, M. H., 2006, "Analysis of Flow Resistance in Microchannels at Slip-Flow Regime by Direct Simulation Monte Carlo Method," *Transaction of the KSME B*, Vol. 30, No. 1, pp. 1~7.