

Ein Ansatz zur Modellierung CNT-basierter thermischer Vias für den effektiven Wärmetransport in elektronischen Schaltkreisen

Jörg Hertwig, Holger Neubert, Jens Lienig
Technische Universität Dresden
Institut für Feinwerktechnik und Elektronik-Design
01062 Dresden

Kurzfassung

Thermische Vias sind wichtige Elemente zur Verlustleistungsabfuhr in elektronischen Baugruppen. Die fortschreitende Miniaturisierung verlangt ständig sowohl besser Wärme leitende als auch kleinere thermische Vias. Ein großes Potenzial, diese Forderungen zu erfüllen, liegt in der Anwendung von Kohlenstoffnanoröhren (CNTs) als Viamaterial. Der Beitrag stellt ein Mehrskalen-Modell thermischer Vias und Viefelder mit CNT-Kompositwerkstoffen vor. Sein Kerngedanke besteht in der Berechnung der Eigenschaften einer Basiszelle aus Matrixwerkstoff, in die CNTs als Linienelemente eingebettet sind, mit der Finite-Elemente-Methode. Die berechneten Eigenschaften fließen in höhere Modellebenen ein. Damit gelingt erstmals die Modellierung CNT-basierter thermischer Vias und Viefelder. Das Ziel ist es, funktionell lohnende Ansatzpunkte für technologisch orientierte Forschungsarbeiten zu bestimmen.

Einleitung

Als unvermeidliches Nebenprodukt fällt in elektronischen Bauelementen und Leitungen Wärme an, mit negativen Auswirkungen auf die Funktion und Zuverlässigkeit. Die frei gesetzte Wärme muss von den Quellen zu Wärmesenken, z. B. in ein Kühlmedium, und letztlich in die Umgebung transportiert werden. Dazu sind entsprechende Strukturen und Elemente des thermischen Managements erforderlich. Diese sind bereits beim Entwurf elektronischer Baugruppen, z. B. von elektronischen Schaltkreisen, zu berücksichtigen. Die stetige Verkleinerung von Funktionselementen elektronischer Systeme bis hinab zu Nanometerabmessungen führt zu einer Vielzahl von Herausforderungen im Entwurfsprozess, wobei sich die thermischen wegen der permanent steigenden Verlustleistungsdichten als besonders kritisch erweisen.

Ein thermisches Modell der elektronischen Baugruppe beschreibt die Wärmepfade, entlang derer die Verlustleistung abgeführt wird. Ein Wärmepfad repräsentiert den thermischen Widerstand R_{th} von der Wärmequelle mit der Leistung P zur Wärmesenke:

$$R_{th} = \frac{\Delta T}{P}, \quad (1)$$

wobei zwischen Quelle und Senke die Temperaturdifferenz ΔT entsteht. Bei eindimensionaler Wärmeleitung durch gerade prismatische Festkörper, wie sie typisch in elektronischen Bauelementen und Baugruppen sind, kann Gl. (1) spezifiziert werden:

$$R_{th} = \frac{L}{\lambda \cdot A}, \quad (2)$$

mit der Länge L , der Querschnittsfläche A und der spezifischen thermischen Leitfähigkeit λ des prismatischen Körpers.

Ein besonderer Engpass der Wärmeübertragung ist der senkrechte Durchgang durch Leitungsebenen in Leiterplatten und Schaltkreisen. Gegenwärtig verwendete organische Substrate haben meistens eine geringe Wärmeleitfähigkeit im Bereich von 0,2 bis 0,5 W/(m·K), keramische von 1 bis 100 W/(m·K). Die anisotrope Struktur derartiger Ebenen hat zudem eine anisotrope Wärmeleitfähigkeit zur Folge. Aufgrund der höheren thermischen Leitfähigkeit der elektrischen Verbindungen im Vergleich zum Substratwerkstoff ist der Wärmetransport in der Leitungsebene rund zehnmals besser als senkrecht durch das Substrat hindurch.

Thermische Vias

Ein etabliertes Prinzip, Wärme durch Substrate zu leiten, sind thermische Vias. Ein thermisches Via ist eine Durchkontaktierung zwischen mindestens zwei Leiterebenen eines Verdrahtungsträgers aus gut Wärme leitendem Werkstoff mit der Funktion, den Wärmewiderstand zwischen den kontaktierten Ebenen zu verringern (Bild 1).

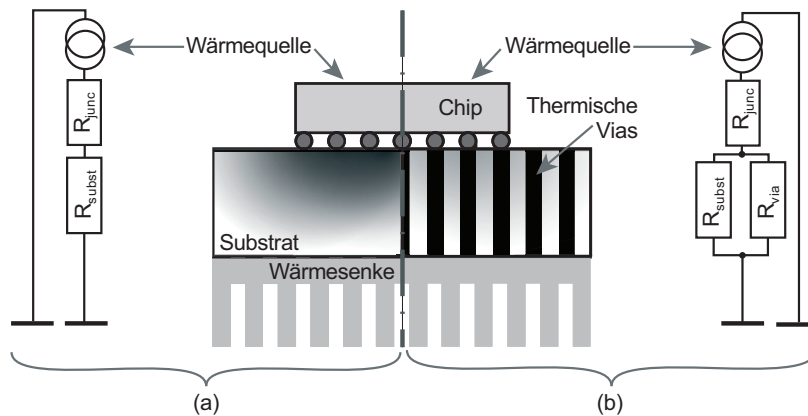


Bild 1: Wärmepfade und zugehöriges Netzwerkmodell (a) ohne und (b) mit thermischen Vias.

Im Allgemeinen wird für thermische Vias Kupfer eingesetzt, da es eine gute Wärmeleitfähigkeit besitzt, relativ kostengünstig und ohnehin in viele Prozessschritte integriert ist. Jedoch stößt die Anwendung solcher konventioneller thermischer Vias mit der weitergehenden Miniaturisierung an Grenzen, besonders in Schaltkreisen mit großer Verlustleistung. Der Trend zu 3D-Anordnungen verschärft diese Problematik durch die damit verbundenen höheren Verlustleistungsdichten und längeren Wärmepfade. Das Potential, das sich aus der optimierten Platzierung von thermischen Vias ergibt, ist bereits weitgehend ausgeschöpft [9]. Künftig werden daher thermische Vias mit geringerem Wärmewiderstand bei ungefähr gleichen oder sogar kleineren Abmessungen verlangt. Nach Gl. (2) gibt es drei Möglichkeiten, den Wärmewiderstand eines thermischen Vias zu senken:

1. Verkleinern der Länge des Wärmepfades, d. h. Verringern der Schichtdicke des Substrates oder des Verdrahtungsträgers,
2. Vergrößern der Querschnittsfläche des Vias sowie
3. Erhöhen der Wärmeleitfähigkeit des Viamaterials.

Der Verkleinerung der Schichtdicke des Substrates oder des Verdrahtungsträgers sind durch die notwendige mechanische Stabilität und die erforderlichen Lagenanzahl enge Grenzen gesetzt. Ebenfalls nur begrenzt anwendbar ist eine Vergrößerung der Querschnittsflächen, da die Fläche der thermischen Vias der elektrischen Verdrahtung verloren geht. Allein die Möglichkeit, durch Anwendung hochleitfähiger Werkstoffe zu kleineren thermischen Widerständen der Vias zu kommen, ist vielversprechend. Eine besondere Rolle werden hierbei in Zukunft Kohlenstoffnanoröhren spielen.

CNT-basierte Kompositwerkstoffe

Die Wärmeleitfähigkeit von Kohlenstoffnanoröhren (engl. Carbon NanoTubes, CNTs) beträgt theoretisch $6000 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$; gemessen wurden Werte zwischen 2000 und $3000 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ [12]. Damit sind sie die besten bekannten Wärmeleiter und etwa zehnmals bessere als Metalle.

Es gibt verschiedene Typen von CNTs, die abhängig von dem Winkel entstehen, unter dem eine monomolekulare Kohlenstoffschicht zu einer Nanoröhre aufgerollt ist. Diese Typen

werden durch ihre Chiralität beschrieben und durch ein Indexpaar (n, m) gekennzeichnet (Bild 2.a). Sie heißen armchair (n, n) , zig-zag $(n, 0)$ und chiral (n, m) (Bild 2.b). CNTs können außerdem einwandig (engl. Single-Walled Nanotubes, SWNTs) oder mehrwandig (engl. Multi-Walled Nanotubes, MWNTs) sein.

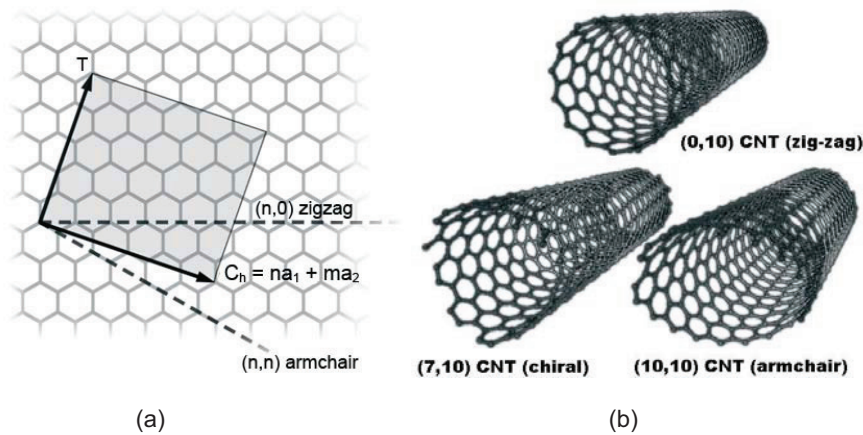


Bild 2: Benennungsschema für CNTs repräsentiert durch (a) den Vektor des Rollwinkels der monomolekularen Kohlenstoffschicht und (b) unterschiedliche Chiralitäten [26].

Mit CNTs lassen sich Kompositwerkstoffe herstellen, die die Eigenschaften von Kompositmatrix und eingebetteten CNTs vorteilhaft kombinieren. In den bisher veröffentlichten Untersuchungen zu solchen Kompositen in thermischen Anwendungen wurden die CNTs meist ungeordnet in das Matrixmaterial gegeben, um die thermische Leitfähigkeit zu erhöhen. In der Regel bilden Kunststoffe die Matrix des Komposits, meist ein Epoxydharz. CNTs werden in einem Volumenanteil von 1 bis 10 Masseprozent eingebracht. Die thermische Leitfähigkeit solcher Komposite steigt gegenüber dem ungefüllten Basismaterial um einen Faktor bis 3,6 [13]. Untersuchungen mit anderen Polymeren und Metallen als Matrixmaterial, z. B. Kupfer und Aluminium, haben vergleichbare Ergebnisse [7, 25].

Offensichtlich verbessern ungeordnete, nicht ausgerichtete CNTs in einem Matrixwerkstoff die thermische Leitfähigkeit nur wenig. Dies ist verständlich, da erstens der Wärmetransport in CNTs hauptsächlich axial stattfindet und zweitens sich die ungeordneten CNTs kaum berühren, also zwischen ihnen die Wärmeleitung von der Matrix bestimmt ist. Um das Potenzial der hohen thermischen Leitfähigkeit von CNTs weitergehend zu nutzen, sind CNTs daher auszurichten und zu kontaktieren. Zur Ausrichtung sind folgende Möglichkeiten bekannt:

- strömungsmechanische Ausrichtung durch Einschweben in schmale Kanäle [15],
- Ausrichtung in einem elektrischen Feld durch Dielektrophorese [8, 13],
- gerichtetes Wachstum der CNTs auf einem Katalysator [1, 3],
- Rotationsbeschichtung [14] und
- manuelles Platzieren einzelner CNTs auf einer funktionalisierten Oberfläche [2, 23].

Die vorgestellten Ansätze erlauben die Ausrichtung einer geringen Anzahl von CNTs. Ihre Anwendung für Komposite ist nach wie vor eine Herausforderung. Zu beachten ist, dass Komposite mit ausgerichteten CNTs die Wärme anisotrop leiten.

Um mechanischen und damit besseren thermischen Kontakt von CNTs zu angrenzenden Festkörperoberflächen herzustellen, gibt es ebenfalls verschiedene Möglichkeiten:

- Löten mit metallischem Lot [6],
- Kontaktieren mit funktionalisierten Gruppen [5],
- galvanisches Verbinden von CNTs [13] oder

- mechanische Verbindung der CNTs [8].

Während ein mechanischer Kontakt zwischen CNT und angrenzender Festkörperoberfläche den thermischen Übergangswiderstand in der Grenzfläche verringert, erhöht sich der Wärmewiderstand der CNTs, wenn sie sich gegenseitig mit ihren Mantelflächen berühren. Dies beruht auf der Störung des ballistischen Phonentransportes in den CNTs [10]. Da CNTs dazu neigen, zusammenzuklumpen, ist die Ausrichtung unter weitgehender Vermeidung von gegenseitigen Berührungen in Kompositen eine gegenwärtig ungelöste Herausforderung [27].

Das Anwendungspotential der verschiedenen technologischen Ansätze für thermische Vias lässt sich aufgrund des komplexen Verhaltens von CNTs in Kompositen derzeit nur durch eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen bestimmen. Deshalb sind Modelle wünschenswert, mit denen sich das zu erwartende thermische Verhalten von Elementen vorhersagen lässt, die nach diesen technologischen Ansätzen hergestellt sind. Ziel dieses Beitrages ist es daher, im Hinblick auf die Funktion lohnende technologische Entwicklungsansätze von thermischen Vias zu bestimmen.

Modellierung des thermischen Verhaltens von CNT-Kompositen

Die bisher veröffentlichten Modelle CNT-basierter Komposite basieren in der Regel auf der Theorie des effektiven Mediums. Sie unterscheiden sich hauptsächlich in den Vereinfachungen zur Modellierung der in die Matrix eingebetteten CNTs, in der Dimensionalität des Ansatzes und den verwendeten Berechnungsverfahren. Die Vereinfachungen modellieren die CNTs als Rotationsellipsoide [4], Hohlzylinder [22, 29], prismatische Stäbe [21, 24] oder Linien [20]. Den Berechnungen liegen zwei- [20] oder dreidimensionale [21, 22, 29] Basiszellen zugrunde. Als Lösungsverfahren werden die Randelementemethode [16], Randintegralgleichungen [20], die Finite-Elemente-Methode [22, 29] und die Element-freie Galerkin-Methode [11] eingesetzt. Manche Untersuchungen basieren auf analytischen Lösungen [19, 18, 28] oder Methoden der dissipativen Teilchendynamik [17]. Stochastische Aspekte in der Anordnung und den Eigenschaften der CNT sind kaum berücksichtigt [21].

Alle diese Untersuchungen beziehen jeweils nur ausgewählte Teilaspekte in die Modellierung ein. Sie sind damit ungeeignet, Strukturen in den typischen Abmessungen thermischer Vias und Viafelder zu modellieren, die um Größenordnungen über denen der CNTs und der Basiszellen liegen. Ein dafür geeigneter Ansatz muss, wenn er die Eigenschaften einer Basiszelle des effektiven Mediums berechnet, folgende Effekte berücksichtigen:

- Wärmetransport in den eingebetteten CNTs,
- Einfluss von gegenseitigen Berührungen der CNTs in der Matrix,
- Wärmetransport in der Matrix und
- Wärmeübergang zwischen CNTs und der Matrix.

Dazu wird ein hierarchischer Modellierungsansatz mit den Modellebenen CNT, Komposit-Basiszelle und thermisches Via bzw. Viafeld mit jeweils angepassten Detaillierungsgrad vorgestellt (Bild 3). Ein solcher Ansatz minimiert die Anzahl der Freiheitsgrade im Modell und gestattet die Bewertung unterschiedlicher konstruktiv-technologischer Prinziplösungen. Ein weiterer Vorteil ist seine hohe Granularität.

Bedingt durch das hohe Aspektverhältnis und aufgrund der spezifischen Mechanismen des Wärmetransports findet die Wärmeleitung in CNTs nahezu eindimensional in Längsrichtung statt. Vernachlässigt man transiente Prozesse und beschränkt sich auf die Wärmeleitung in Längsrichtung, vereinfacht sich der Wärmewiderstand eines CNT zu:

$$R_{\text{th-CNT}} = \frac{L_{\text{CNT}}}{A}. \quad (3)$$

L_{CNT} ist die Länge des CNT und A ist ein CNT-spezifischer Parameter, der die auf eine Längeneinheit bezogene thermische Leitfähigkeit des CNT repräsentiert. Diese ist von vielen Einflussfaktoren abhängig, z. B. dem Typ, der Länge und dem Durchmesser eines CNT. Einen wesentlichen Einfluss hat auch die Temperatur. Eine Bestimmung des Parameters A ist mit molekulardynamischen Simulationen oder experimentellen Untersuchungen möglich, wobei beide Möglichkeiten aufwendig sind.

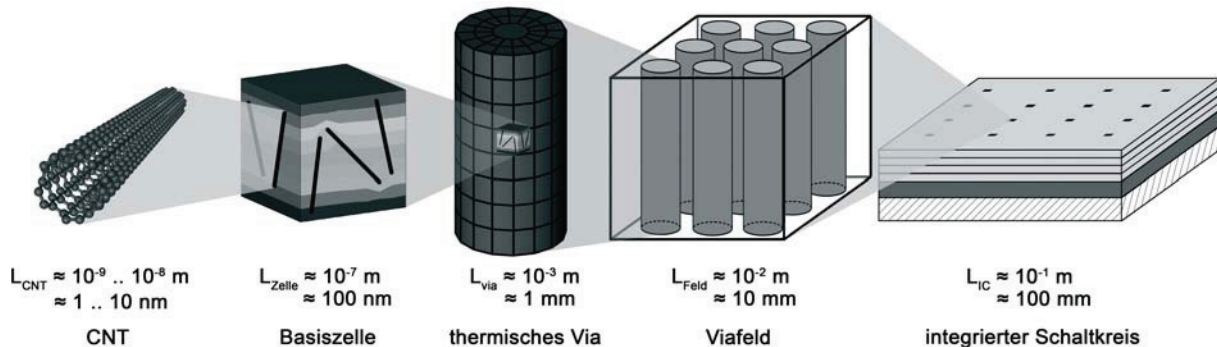


Bild 3: Im Rahmen dieser Arbeit entwickeltes Mehrskalennmodell thermischer Viafelder mit CNT-Kompositen.

Die Basiszelle des Komposits ist nach der Finite-Elemente-Methode modelliert, wobei die eingebetteten CNTs als Ketten von Linienelementen gemäß Gl. (3) in der dreidimensionalen Basiszelle dargestellt sind. Position und Orientierung der Linienelemente in der Basiszelle berücksichtigen die zufällige Anordnung der CNTs im Komposit mit Verteilungsfunktionen. Der A -Parameter jedes Linienelements hängt vom Abstand zum nächstgelegenen Knoten der Matrix oder benachbarter Ketten von Linienelementen ab. Damit ist der Einfluss von Kontakten von CNTs untereinander und mit der Matrix modelliert.

Das Modell der Basiszelle errechnet eine anisotrope Wärmeleitfähigkeit des Kompositwerkstoffes, gemittelt über die Abmessungen der Basiszelle. Sie geht als Parameter in höhere Modellebenen ein, also in die Modelle von Vias und Viafeldern. Um Inhomogenitäten in den Eigenschaften, der Anordnung oder den Umgebungsbedingungen der CNTs in höheren Modellebenen zu berücksichtigen, sind entsprechend viele Basiszellen anzulegen und zu berechnen.

Zusammenfassung und Ausblick

Das entwickelte Mehrskalennmodell gestattet Parameterstudien hinsichtlich Typ und Abmessungen der CNTs, ihrer Anordnung im Komposit sowie Einflussfaktoren der Umgebung. Damit lässt sich die Wirkung technologischer Ansätze, z. B. zur Ausrichtung und Kontaktierung der CNTs, vergleichen und bewerten. Auch ist der optimale Volumenanteil von CNTs im Komposit abhängig von ihrer Länge und ein hinreichender Ausrichtungsgrad ermittelbar. Dabei werden erstmalig solche Einflüsse wie CNT-Durchmesser, Volumenanteil, Ausrichtung oder lokale inhomogene Anordnung gemeinsam in einem dreidimensionalen Modell erfasst. Perspektivisch lassen sich mit den Modellen die Eigenschaften verschiedener Anordnungen von thermischen Vias in Viafeldern simulieren und optimieren.

Literatur

- [1] Yoshinori Ando, Xinluo Zhao, Toshiki Sugai, and Mukul Kumar. Growing carbon nanotubes. *Materials Today*, 7(10):22–29, October 2004.
- [2] Phaedon Avouris, Zhihong Chen, and Vasili Perebeinos. Carbon-based electronics. *Nature Nanotechnology*, 2:605–615, October 2007.

- [3] Yuji Awano. Carbon nanotube technologies for LSI via interconnects. *IEICE Transactions on Electronics*, E89-C(11):1499–1503, November 2006.
- [4] Aniruddha Bagchi and Seiichi Nomura. On the effective thermal conductivity of carbon nanotube reinforced polymer composites. *Composites Science and Technology*, 66:1703–1712, 2006.
- [5] Vasudevanpillai Bijua, Tamitake Itoha, Yoji Makitab, and Mitsuru Ishikawa. Close-conjugation of quantum dots and gold nanoparticles to sidewall functionalized single-walled carbon nanotube templates. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 183:315–321, 2006.
- [6] D.-A. Borca-Tasciuc, L. Pietruszka, T. Borca-Tasciuc, R. Vajtai, and P.M. Ajayan. Thermal transport measurements in multi-wall carbon nanotube strands using the 3/spl omega/ method. In *Semiconductor Thermal Measurement and Management Symposium, 2005 IEEE Twenty First Annual IEEE*, pages 247–252, 15-17 March 2005.
- [7] Yang Chai, Kai Zhang, Min Zhang, P. C. H. Chan, and M. M. F. Yuen. Carbon nanotube/copper composites for via filling and thermal management. In *Proc. 57th Electronic Components and Technology Conf. ECTC '07*, pages 1224–1229, May 29 2007–June 1 2007.
- [8] S. Evoy, M.A. Rieglman, N. Naguib, Haihui Ye, P. Jaroenapibal, D.E. Luzzi, and Y. Gogotsi. Dielectrophoretic assembly of carbon nanofiber nanoelectromechanical devices. *Nanotechnology, IEEE Transactions on*, 4(5):570–575, Sept. 2005.
- [9] B. Goplen and S.S. Sapatnekar. Placement of thermal vias in 3-D ICs using various thermal objectives. *Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, 25(4):692–709, April 2006.
- [10] Dimitrios V. Papavassiliou Shigeo Maruyama Hai M. Duong, Namiko Yamamoto and Brian L. Wardle. Inter-carbon nanotube contact in thermal transport of controlled-morphology polymer nanocomposites. *Nanotechnology*, 20:1–23, March 2009.
- [11] Morinobu Endo Indra Vir Singh, Masataka Tanaka. Effect of interface on the thermal conductivity of carbon nanotube composites. *ScienceDirect*, 46:842–847, 2007.
- [12] P. Kim, L. Shi, A. Majumdar, and P.L. McEuen. Thermal transport measurements of individual multi-walled nanotubes. *Physical Review*, 87:1–4, 2001.
- [13] Torsten Koker. *Konzeption und Realisierung einer neuen Prozesskette zur Integration von Kohlenstoff-Nanoröhren über Handhabung in technischen Anwendungen*. Dissertation, Schriftenreihe des Instituts für Automatisierungstechnik, Universität Karlsruhe (TH), Band 14, 2006.
- [14] Melbourne C. LeMieux, Mark Roberts, Soumendra Barman, Yong Wan Jin, Jong Min Kim, and Zhenan Bao. Self-sorted, aligned nanotube networks for thin-film transistors. *Science*, 321(5885):101–104, July 2008.
- [15] J. Li, Q. Zhang, Y. Yan, S. Li, and L. Chen. Fabrication of carbon nanotube field-effect transistors by fluidic alignment technique. *Nanotechnology, IEEE Trans. on*, 6(4):481–484, July 2007.
- [16] Y. J. Liu and X. L. Chen. Continuum models of carbon nanotube-based composites using the boundary element method. *Electronic Journal of Boundary Elements*, 1:316–335, 2003.
- [17] Amitesh Maiti. Multiscale modeling with carbon nanotubes. *Microelectronics Journal*, 39:208–221, 2008.
- [18] C.-W. Nan, Z. Shi, and Y. Lin. A simple model for thermal conductivity of carbon nanotube-based composites. *Chemical Physics Letters*, 375:666–669, 2003.
- [19] Ce-Wen Nan, Gang Liu, Yuanhua Lin, and Ming Li. Interface effect on thermal conductivity of carbon nanotube composites. *Applied Physics Letters*, 85:3549–3551, 2004.
- [20] N. Nishimura and Y. J. Liu. Thermal analysis of carbon-nanotube composites using a rigid-line inclusion model by the boundary integral equation method. *Comput Mech*, 35:1–10, 2004.
- [21] K. Sanada, Y. Tada, and Y. Shindo. Thermal conductivity of polymer composites with close-packed structure of nano and micro fillers. *Composites: Part A*, 40:724–730, 2009.
- [22] Young Seok Song. Evaluation of effective thermal conductivity for carbon nanotube/polymer composites using control volume finite element method. *Carbon*, 44:710–717, 2006.
- [23] Ramsey Stevens, Cattien Nguyen, and M. Meyyappan. Nanomanipulation and fabrication by ion beam molding. *Nanotechnology, IEEE Trans. on*, 5(3):255–257, May 2006.
- [24] Konstantinos I. Tserpes and Paraskevas Papanikos. Continuum modeling of carbon nanotube-based superstructures. *Composite Structures*, 91:131–137, 2009.
- [25] Toshiyuki Ueno, Takashi Yoshioka, Jin ichi Ogawa, Nobuaki Ozoe, Kiminori Sato, and Katsumi Yoshino. Highly thermal conductive metal/carbon composites by pulsed electric current sintering. *Synthetic Metals*, 159:2170–2172, 2009.
- [26] Wikipedia. <http://en.wikipedia.org/wiki/file:cntnames.png>, 01.10.2005.
- [27] M. Wirts-Rutters, M. Heimann, J. Kolbe, and K. J. Wolter. Carbon nanotube (CNT) filled adhesives for microelectronic packaging. In *Proc. 2nd Electronics Systemintegration Technology Conf. ESTC 2008*, 1057–1062, 1–4 Sept. 2008.
- [28] Q.Z. Xue. Model for thermal conductivity of carbon nanotube-based composites. *Physica B*, 368:302–307, 2005.
- [29] Xin-She Yang. Modelling heat transfer of carbon nanotubes. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 13:893–902, 2005.