

# Modellierung CNT-basierter thermischer Vias für den effektiven Wärmetransport

Jörg Hertwig, Matthias Thiele, Holger Neubert, Jens Lienig  
 {hertwig, thiele, neubert, lienig}@ifte.de

Technische Universität Dresden, Institut für Feinwerktechnik und Elektronik-Design

## Kurzfassung

Thermische Vias sind wichtige Elemente zur Verlustleistungsabführung. Sie sind mit fortschreitender Miniaturisierung elektronischer Bauelemente und Strukturen ständig zu verbessern. Großes Potenzial, diese Herausforderung zu erfüllen, liegt in der Anwendung von hochwärmeleitfähigen Werkstoffen, besonders von Kohlenstoffnanoröhren (CNTs) und deren Kompositen. Die zielgerichtete Technologieentwicklung verlangt den Einsatz von mathematischen Modellen. Der Beitrag stellt ein thermisches Modell für CNT-basierte Komposite sowie mit ihm erzielte Simulationsergebnisse vor. Der Einfluss von Füllgrad, Ausrichtung und Struktureigenschaften der eingebetteten CNTs auf das thermische Verhalten des Komposits wird untersucht. Aus dem CNT-Komposit-Modell wird ein Mehrskalmodell für thermische Vias und Viafelder entwickelt. Damit sind funktionell lohnende Ansatzpunkte für technologisch orientierte Forschungsarbeiten bestimmbar.

## 1 Einleitung

Als unvermeidliches Nebenprodukt fällt in elektronischen Bauelementen und Leitungen Wärme an, mit negativen Auswirkungen auf die Funktion und Zuverlässigkeit. Die freigesetzte Wärme muss von den Quellen weg über geeignete Wärmepfade in höhere Systemebenen und letztlich in die Umgebung transportiert werden. Ein besonderer Engpass der Wärmeabführung ist der senkrechte Durchgang durch Leitungsebenen in Schaltkreisen und Leiterplatten, insbesondere wegen der geringen Wärmeleitfähigkeit der verwendeten Substrate und der hohen Wärmestromdichten in unmittelbarer Nähe der Quellen. Um diesen kritischen Wärmedurchgang zu verbessern, verwendet man *thermische Vias*. Konventionelle thermische Vias auf Kupferbasis stoßen derzeit an die Grenzen ihrer Leistungsfähigkeit, besonders in Schaltkreisen mit großer Verlustleistung oder dreidimensionaler Bauelementeanordnung („3D-Integration“). Künftig werden deutlich kleinere Wärmewiderstände bei ungefähr gleichen oder kleineren Via-Abmessungen verlangt. Erfolg verspricht vor allem die Anwendung von Werkstoffen hoher Wärmeleitfähigkeit als Viamaterial.

Besonders Kompositwerkstoffe mit *Kohlenstoffnanoröhren* (engl. *Carbon Nano Tubes*, *CNTs*) sind aufgrund ihrer hohen Wärmeleitfähigkeit hierfür geeignet. Bisher wurden hauptsächlich CNT-Kunststoff-Komposite untersucht, die jedoch nur thermische Leitfähigkeiten bis zum 3,6-fachen des ungefüllten Matrixmaterials erreichen. Um die Leitfähigkeit weiter zu steigern, sind die CNTs zum einen an angrenzenden Festkörperoberflächen zu kontaktieren. Zum anderen sind sie im Komposit auszurichten, ohne dass es dabei zu gegenseitigen Berührungen und Verklumpungen kommt. Dies ist ein technologisch ungelöstes Problem.

Um der technologischen Forschung Ziele und Richtungen zu geben, sind Modelle zur Berechnung des thermischen Verhaltens von Kompositen wünschenswert. Dieser Beitrag stellt solche Modelle und mit ihnen erzielte Simulationsergebnisse vor.

## 2 Thermisches Modell von CNT-Kompositen

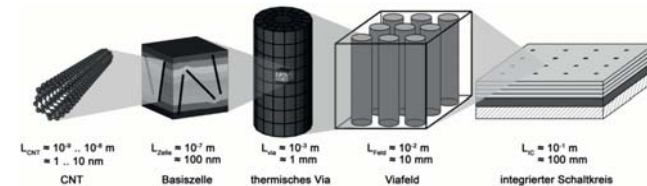
Das entwickelte thermische Modell basiert auf der Theorie des effektiven Mediums. Es berücksichtigt den Wärmetransport in den eingebetteten CNTs und der Matrix, den Einfluss von gegenseitigen Berührungen der CNTs, den Wärmeübergang zwischen CNTs und Matrix sowie stochastische Aspekte der Anordnung der CNTs im Komposit.

Der dazu in [1] entwickelte hierarchischer Modellierungsansatz mit den Modellebenen CNT, Komposit-Basiszelle und thermisches Via bzw. Viafeld mit jeweils angepassten Detaillierungsgrad ist in Bild 1 veranschaulicht. 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.

Jedes einzelne CNT einer Basiszelle wird wegen der nahezu eindimensionalen Wärmeleitung als ein Linienelement mit einer spezifischen Wärmeleitfähigkeit modelliert. Dies ist zur Beschreibung stationärer Vorgänge ausreichend. Die spezifische Wärmeleitfähigkeit der CNT ist von Struktur und Abmessungen des CNT sowie der Temperatur abhängig. Die dreidimensionale Basiszelle des Komposits wird nach der Finite-Elemente-Methode (FEM) modelliert, wobei die eingebetteten CNTs als Ketten von Linienelementen implementiert sind. Position und Orientierung der Linienelemente berücksichtigen die zufällige Anordnung der CNTs mit Verteilungsfunktionen. Der Einfluss von Kontakten von CNTs untereinander wird über den Abstand benachbarter Linienelemente berücksichtigt.

## 3 Thermisches Modell von Vias und Viafeldern

Das Modell der Basiszelle errechnet die anisotrope Wärmeleitfähigkeit des Komposits, gemittelt über die Abmessungen der Basiszelle. Sie geht als Parameter in die Modelle von Vias und Viafeldern ein (Bild 1). Um Inhomogenitäten in den Eigenschaften, der Anordnung oder den Umgebungsbedingungen der CNTs in höheren Modellebenen zu berücksichtigen, sind entsprechend viele Basiszellen anzulegen.

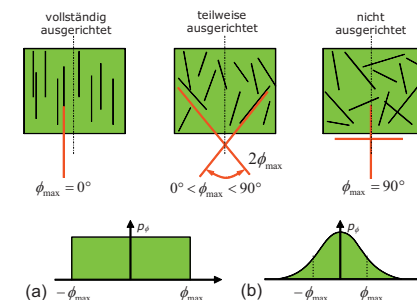


**Bild 1.** Mehrskalmodell thermischer Viafelder mit CNT-Kompositen [1]

## 4 Simulationsergebnisse

Beispielhaft untersucht wurde die Basiszelle für ein Epoxydharz-Komposit mit (10,10)-CNTs<sup>1</sup> einer Länge von 80 nm. Die Ergebnisse beziehen sich auf die Leitfähigkeit der ungefüllten Matrix und geben die Werte in Richtung der Ausrichtungsachse der CNTs an. Entlang dieser Achse erreicht das Komposit die größte effektive Wärmeleitfähigkeit.

Zunächst wird die Ausrichtung von CNTs im Komposit untersucht. Die Ausrichtung jedes CNT im Kompositmodell weicht um einen Winkel  $\phi$  von einer definierten Achse ab. Die Verteilungsdichte der Winkel aller im Komposit angeordneten CNTs quantifiziert den Grad der Ausrichtung der CNTs im Komposit.



**Bild 2** Ausrichtungswinkel  $\phi$  bei (a) gleich- und (b) normalverteilter Anordnung der CNTs im Komposit

<sup>1</sup> 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: armchair (n, n), zig-zag (n, 0) und chiral (n, m) CNTs. [7].

Bei gleich verteilter Anordnung beschreibt  $\phi_{\max}$  die maximale Verdrehung der CNTs gegenüber der definierten Achse (Bild 2).  $\phi_{\max} = 0^\circ$  bedeutet daher eine vollständige Ausrichtung und  $\phi_{\max} = 90^\circ$  eine vollständige Unordnung. Bei normalverteilten CNTs gibt  $\phi_{\max}$  die Standardabweichung der Winkel  $\phi$  aller CNTs im Komposit an.

Simulationsergebnisse für verschieden starke Ausrichtungen zeigt Bild 3 bei Annahme von gleichverteilten, Bild 4 von normalverteilten CNTs. Beide Verteilungen weisen auf ein ähnliches Verhalten hin. Deshalb werden im Weiteren nur gleichverteilte CNTs vorgestellt.

Komplett oder nahezu komplett zum Wärmestrom ausgerichtete CNTs erzielen erwartungsgemäß die größte thermische Leitfähigkeit des Komposits. Sie erreicht maximal das 11-fache der Wärmeleitung der Matrix. Je ungeordneter die CNTs, desto geringer wird sie. Bei einem Komposit mit ungeordneten CNTs erhöht sich die Wärmeleitfähigkeit nur noch maximal um den Faktor drei. Das Maximum der Leitfähigkeit wird abhängig vom Ausrichtungsgrad bei verschiedenen Füllgraden erreicht. Isotrope Komposite erreichen im Beispiel das Leitfähigkeitsmaximum bei einem Massenanteil von etwa 20 %, Komposite mit ausgerichteten CNTs bei etwa 40 %.

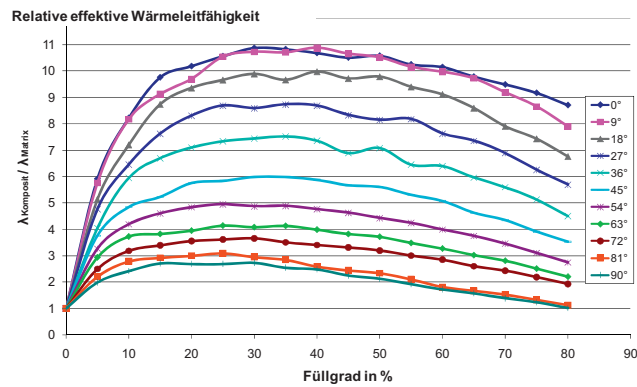


Bild 3 Einfluss des Ausrichtungswinkels  $\phi$  auf die effektive Wärmeleitfähigkeit des Komposits

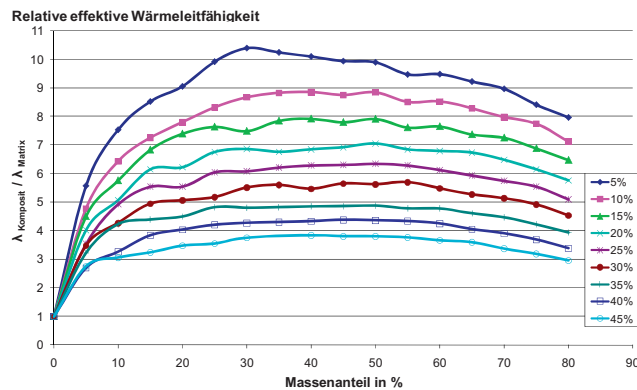


Bild 4 Einfluss der Standardabweichung auf die effektive Wärmeleitfähigkeit des Komposits bei normalverteilten CNTs

Bild 3 zeigt weiterhin, dass ab einem Maximum bei einem bestimmten Füllgrad die Leitfähigkeit des Komposits mit weiter zunehmendem Füllgrad wieder sinkt. Dies ist auf die mit dem Füllgrad zunehmende Anzahl von Kontakten zwischen CNTs in der Matrix zurückzuführen, welche die ballistische Wärmeleitung behindern (Bild 5). In Bild 6 ist zu erkennen, dass dieser Effekt bis zu einem Massenanteil von etwa 5 % kaum eine Rolle spielt. Mit weiter steigendem Füllgrad jedoch begrenzt er immer stärker den Zugewinn an Leitfähigkeit des Komposits, die sich ab etwa 15 % Füllgrad kaum noch steigern lässt.

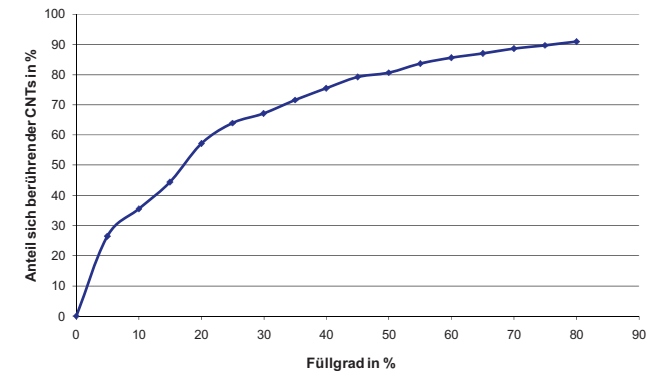


Bild 5 Anteil sich berührender CNTs

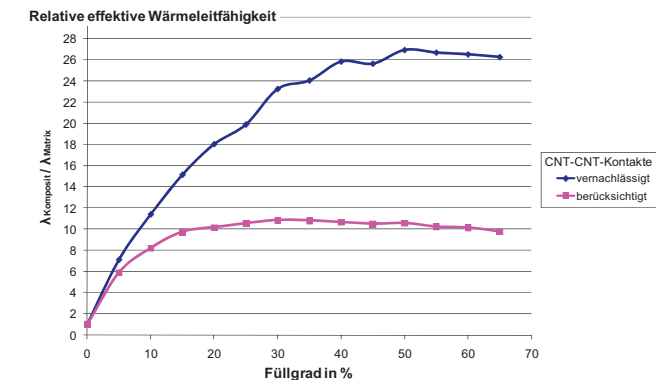


Bild 6 Einfluss der CNT-CNT-Kontakte, abhängig vom Füllgrad bei einem Ausrichtungswinkel  $\phi = 0$

Weiterhin wurden der Einfluss von Länge und Durchmesser der CNT auf die Leitfähigkeit von Kompositen mit ausgerichteten CNTs untersucht. Prinzipiell besser wärmeleitend sind Komposite mit langen (Bild 7) und dünnen CNTs (Bild 8).

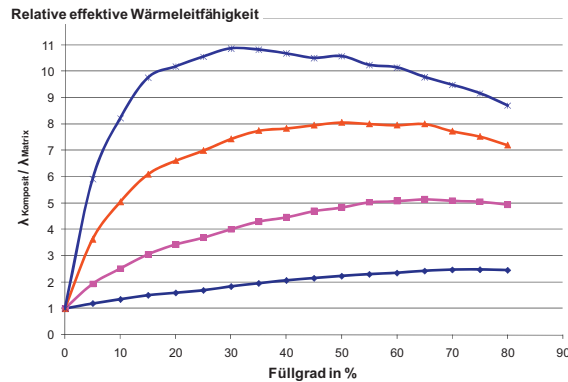


Bild 7 Abhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit von der CNT-Länge

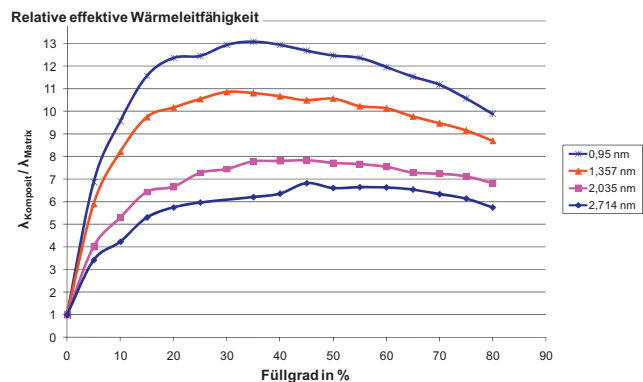


Bild 8 Abhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit vom CNT-Durchmesser

Die zufällige Anordnung der CNTs in der Basiszelle beeinflusst die Ergebnisse. Die daraus resultierende Unsicherheit der Ergebnisse wurde mit einer Stichprobe von 36 unterschiedlichen Anordnungen von CNTs bei vollständiger Ausrichtung mit  $\phi = 0^\circ$  für verschiedene Füllgrade untersucht. Bei kleinen Füllgraden streuen die Ergebnisse maximal um 7 %. Für Füllgrade ab etwa 30 % nimmt die Streuung der Ergebnisse auf etwa 0,6 % ab. Diese Streuungen lassen sich durch größere Basiszellen, allerdings auf Kosten der Rechenzeit, verringern. Mit vom Füllgrad abhängigen Abmessungen der Basiszelle ist eine gleichmäßigere Ergebnisstreuung zu erreichen.

## 5 Diskussion der Ergebnisse

Die mit dem entwickelten Modell errechneten Ergebnisse sind im Hinblick auf die Mechanismen der Wärmeleitung in CNTs und Matrix plausibel. Es ist jedoch schwierig, sie mit experimentellen Befunden oder Simulationsergebnissen in der Literatur zu vergleichen. Bisher veröffentlichte Arbeiten gehen von sehr kleinen Füllgraden

von 1 bis 10 % aus ([7] Füllgrad bis 1,5 %; [2] bis 2 %). Dabei geht der Einfluss der Berührungen der CNTs in der oft erheblichen Messunsicherheit unter (23 % in [5]). Der Effekt wurde jedoch bei Anordnungen von CNTs, die nicht in eine Matrix eingebettet sind, beobachtet. Einzelne CNTs zeigen eine Wärmeleitfähigkeit von bis zu 3000 W/(m·K), Matten mit ausgerichteten CNTs von 250 W/(m·K) und Filze mit ungeordneten CNTs von 20 W/(m·K) [4].

Ebenfalls schwierig ist eine Bewertung der Ergebnisse zum Einfluss der Ausrichtung der CNTs in der Matrix. Die bisher veröffentlichten Modelle lassen keinen Vergleich zu. Experimentelle Untersuchungen zeigen jedoch, dass die Ausrichtung der CNTs einen messbaren Einfluss hat. In [3] konnte beispielsweise die Wärmeleitfähigkeit von Kompositen durch die teilweise Ausrichtung von CNTs gegenüber unausgerichteten etwa verdoppelt werden. Dieses Verhalten zeigt auch das vorgestellte Modell.

Die Leitfähigkeit des Komposites wird weiterhin maßgeblich von Länge und Durchmesser der CNTs bestimmt. Komposite mit langen CNTs leiten Wärme besser als solche mit kürzeren. Dies liegt daran, dass es bei vielen kurzen CNTs häufiger zu einem Wärmeübergang zwischen Matrixmaterial und CNT mit einem entsprechenden Übergangswiderstand kommt. Auch besitzen längere CNTs eine höhere thermische Leitfähigkeit als kurze.

Weiterhin errechnet das Modell für Komposite mit CNTs kleinerer Durchmesser eine höhere thermische Leitfähigkeit als für solche mit größeren (Bild 8). Die Ursache hierfür ist, dass bei gleichem Füllgrad in der Basiszelle eine größere Anzahl von CNTs angeordnet wird, wenn ihr Durchmesser kleiner ist.

Ein Vergleich mit anderen Modellen aus der Literatur ist insgesamt schwierig, da in ihnen verwendete Leitfähigkeiten der CNTs oft unrealistisch hoch (z. B. 3000 W/(m·K) in [6]) oder die experimentellen Untersuchungen, aus denen sie stammen, nicht näher beschrieben sind.

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Das entwickelte Mehrskalmodell für CNT-basierte Kompositwerkstoffe gestattet detaillierte Parameterstudien hinsichtlich Typ, Abmessungen und Anordnung der eingebetteten CNTs sowie Einflussfaktoren der Umgebung. Damit lässt sich erstmals das Potenzial technologischer Ansätze, z. B. zur Ausrichtung und Kontaktierung der CNTs, vergleichen und bewerten. Der theoretisch optimale Volumenanteil von CNTs in einem Komposit kann abhängig von verschiedenen Einflussfaktoren bestimmt werden. Einflüsse wie CNT-Durchmesser, Volumenanteil, Ausrichtung oder lokale inhomogene Anordnung lassen sich so gemeinsam in einem dreidimensionalen Modell erfassen. Die hier vorgestellten Modelle zeigen das beste Potenzial für hochgefüllte Kompositen mit ausgerichteten, relativ langen und sich nicht berührenden CNTs. Perspektivisch lassen sich mit den Modellen die Eigenschaften verschiedener Anordnungen von thermischen Vias in Viefeldern simulieren und optimieren.

## 7 Literatur

- [1] Hertwig, J.; Neubert, H.; Lienig, J. "Ein Ansatz zur Modellierung CNT-basierter thermischer Vias für den effektiven Wärmetransport in elektronischen Schaltkreisen," *Tagungsband Dresdner Arbeitstagung Schaltungs- und Systementwurf (DASS 2010)*, Fraunhofer Verlag, ISBN 978-3-8396-0126-6, S. 43-48, 2010
- [2] Biercuka, M.J.; Llaguno, M.C.; Radosavljevic, M.; Hyunc, J.K.; Johnson, A.T.: "Carbon nano-tube composites for thermal management", *Applied Physics Letters*, 80:2767-1 – 12, 2002.
- [3] Gonnet, P.; Liang, Z.: "Thermal conductivity of magnetically aligned carbon nanotube buckypapers and nanocomposites" *ScienceDirect* 6, S. 119-122, 2006
- [4] Eletsii, A. V.: "Transport properties of carbon nanotubes" *Physics - Uspekhi*, 52, S. 209 – 224, 2009.
- [5] Haggenueller, R.; Guthy, C.; Lukes, J.; Fischer, J.; Winey, K.: "Single wall carbon nanotube/polyethylene nanocomposites: Thermal and electrical conductivity" *Macromolecules*, 40, S. 2417-2421, 2007
- [6] Singh, I. V.; Tanaka, M.: "Effect of interface on the thermal conductivity of carbon nanotube composites", *ScienceDirect*, 46, S. 842-847, 2007
- [7] Bara, A.; Bondar, A. M.; Svasta, P. M.: "Polymer/cnts composites for electronic packaging", *Proc. 1st Electronics Systemintegration Technology Conference*, volume 1, S. 334-336, 2006.