



Politechnika Wrocławska

Modelowanie molekularne w montażu w elektronice

Kierownik: prof. Jan Felba

Wydziałowy Zakład Technologii Aparatury Elektronicznej
Wydział Elektroniki Mikrosystemów i Fotoniki

Plan prezentacji

- Informacje o zespole
- Realizowane prace
 - Polimery usieciowione
- Realizowane projekty:
 - CANOPY
 - „Elastyczna elektronika”
 - NanoTIM

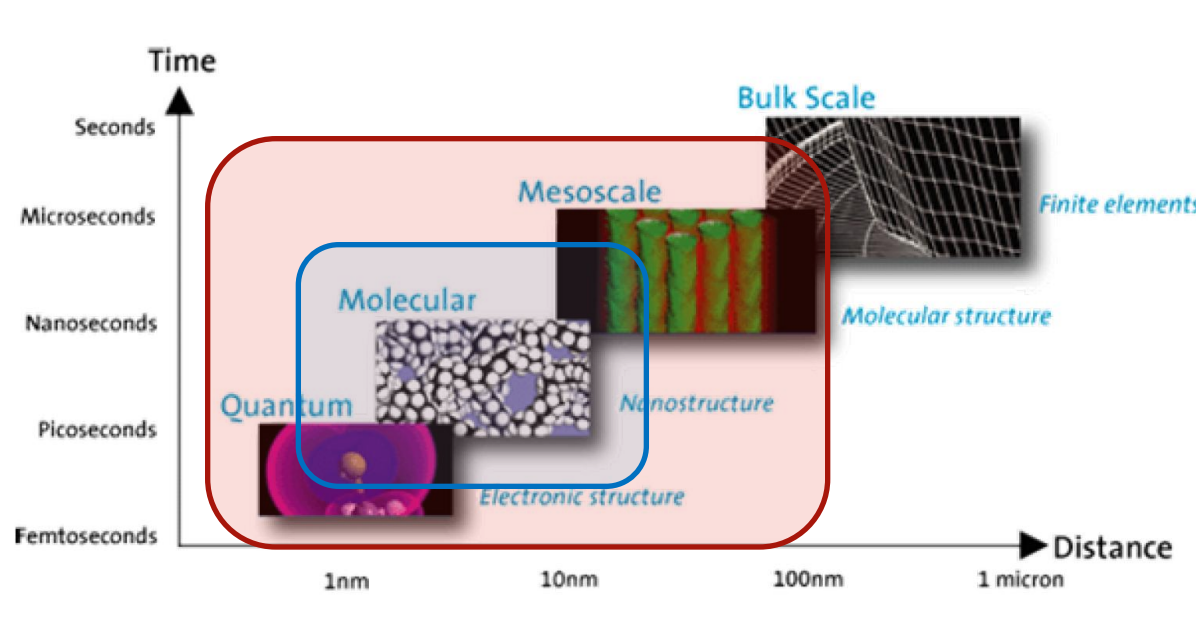
Członkowie zespołu

- Kierownik zespołu: prof. Jan Felba
- Członkowie:
 - dr hab. inż. Artur Wymysłowski, prof. PWr
 - dr inż. Tomasz Fałat
 - mgr inż. Dawid Jan Król
 - mgr inż. Bartosz Płatek
 - mgr inż. Sebastian Tesarski
- www.lipec.info





Oprogramowanie udostępnione przez WCSS



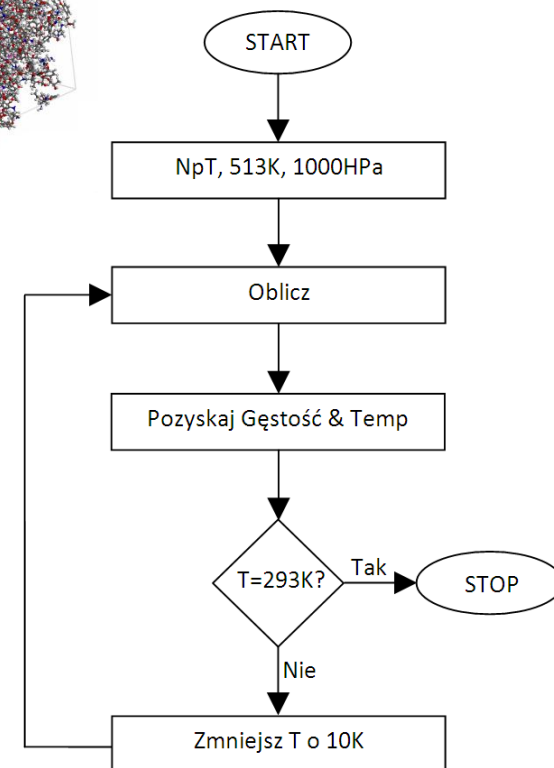
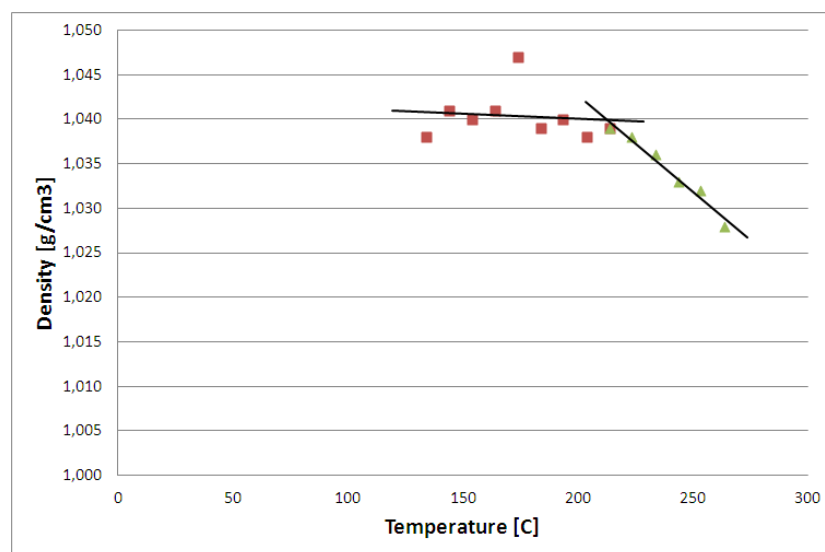
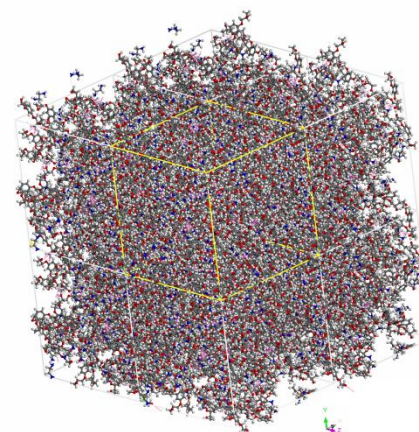
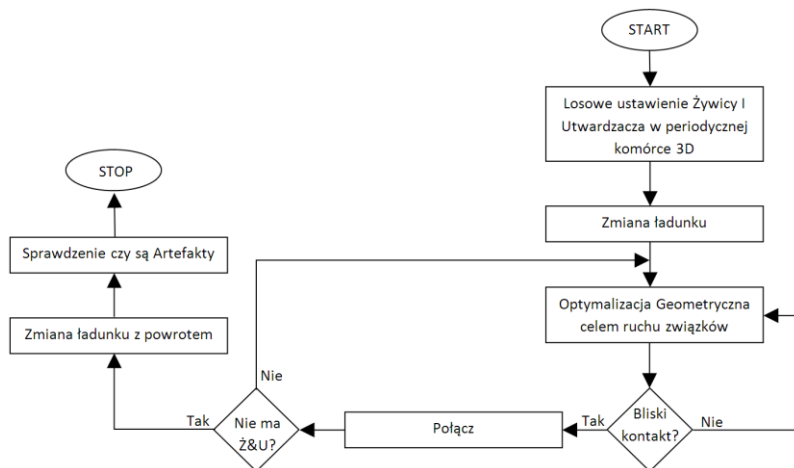
Polimery usieciowione

- Zastosowanie:
 - Hermetyzacja, Flip Chip, Wypraski
 - Kleje elektrycznie i termo przewodzące
 - Podłoża (POD), Elektronika elastyczna, ...
- Właściwości:
 - termiczne : przewodność cieplna, pojemność cieplna, temperatura zeszklenia, etc.
 - mechaniczne : moduł Young'a, współczynnik rozszerzalności cieplnej, etc.
 - inne => elektryczne i chemiczne

Polimery usieciowione (2)

- Żaden z modułów MS nie wspomaga usieciawiania polimerów
- Wykorzystując język PERL przygotowano skrypt do tego celu
- Aby uzyskać $\rho=f(T)$ potrzeba ok. 20 symulacji
- Celem oszczędności czasu przygotowano skrypt, który automatyzuje obliczenia

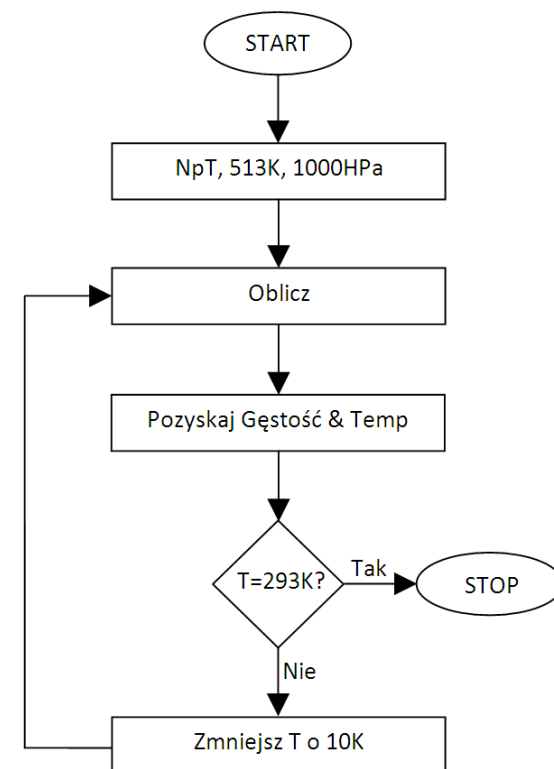
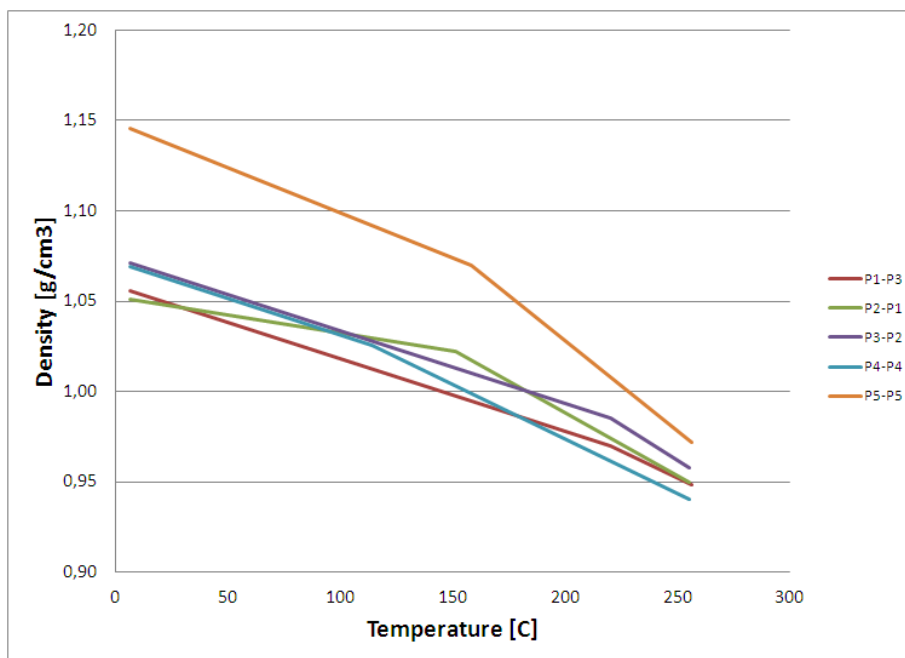
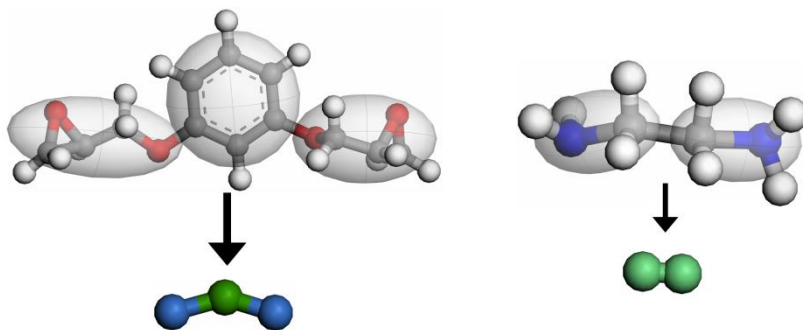
Polimery usieciowione (3)



Polimery usieciowione (4)

- Skala meso: zamiana grupy atomów w pseudo-atom
- Właściwy dobór rozmiaru i składu pseudo-atomów
- Parametryzacja parametrów pola
- Cel => skrócenie czasu obliczeń i np. integracja z metodą MES

Polimery usieciowione (5)



Publikacje

- **Doniesienia konferencyjne:**

- **Tesarski Sebastian**, Hölck Ole, Wymysłowski Artur, *Numerical approach to multiscale evaluation and analysis of Tg of crosslinked polymers*, 11th International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Microsystems, EuroSimE 2010, [Dokument elektroniczny], Bordeaux, France, April 26-27-28, 2010 [Piscataway, NJ] : IEEE, cop. 2010. 4 s., 15 rys., bibliogr. 3 poz.
- **Tesarski Sebastian**, Hölck Ole, Płatek Bartosz, Wymysłowski Artur, *Influence of meso-scale analysis parameters of cross-linked polymers on final simulation results*, Polymer electronics and nanotechnologies: towards system integration [Dokument elektroniczny] : 33rd International Spring Seminar on Electronics Technology, ISSE 2010, 12-16 May 2010, Warsaw, Poland / [eds Piotr Firek, Ryszard Kisiel] Warszawa : Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, 2010. [4] s., [5] rys., 2 tab., bibliogr. 4 poz.
- Felba Jan, Nitsch Karol, Piasecki Tomasz, **Tesarski Sebastian**, Mościcki Andrzej, Kinart Andrzej, Bonfert Detlef, Bock Karlheinz, *Properties of conductive microstructures containing nano sized silver particles*, Proceedings of 2009 11th Electronics Packaging Technology Conference, EPTC 2009 [Dokument elektroniczny], 9-11 December 2009, Singapore [Piscataway, NJ] : IEEE, cop. 2009. s. 879-883., 12 rys., 1 tab., bibliogr. 11 poz.
- Fałat Tomasz, Płatek Bartosz, **Tesarski Sebastian**, Felba Jan, *An approach to measurement and evaluation of the thermal conductivity of thermal adhesive in electronic packaging*, Hetero system integration, the path to new solutions in the modern electronics [Dokument elektroniczny] : 32nd International Spring Seminar on Electronics Technology, ISSE 2009, Brno, Czech Republic, May 13th - 17th 2009 / [ed. Jan Prášek] Piscataway, NJ : IEEE, cop. 2009. [4] s., 5 rys., 2 tab., bibliogr. 4 poz.

- **Rozdział w książce**

- Sebastian J. Tesarski, Artur Wymysłowski , *Glass Transition Analysis of Crosslinked Polymers – Numerical and Mesoscale Approach*, zawarty w : *Molecular Modeling and Multiscaling Issues for Electronic Material Applications*, edytorzy: Nancy Iwamoto, Matthew M.F. Yuen, Haibo Fan, **Springer US**, 2012, New York

Projekt CANOPY

Badania transportu ciepła w nanostrukturach prowadzone były w latach 2007 - 2010 w ramach europejskiego programu EUREKA, akronim CANOPY(CARbon NanOtubes/ePoxY composites),

„Epoksydowe kompozyty z nanorurkami węglowymi o bardzo dużej przewodności cieplnej do montażu elementów elektronicznych. „



Transport ciepła w nanostrukturach

- W Materials Studio (MS) nie ma bezpośredniej możliwości obliczenia przewodności cieplej w żadnym z dostępnych modułów.
- MS dysponuje interpreterem języka skryptowego PERL.
- Opracowano skrypt w języku PERL, który umożliwia uzyskanie informacji o fononowej części przewodnictwa cieplnego.

Transport ciepła w nanostrukturach - implementacja w PERL'u

- Wykorzystano algorytm zaproponowany przez Ikeshoji'a i Hafskjold'a*
Współczynniki pomocnicze:

$$A = E_k + \frac{1}{2} \left(\frac{P}{N} \right)^2 \sum_i \frac{1}{m_i} - \left(\frac{P}{N} \right) \sum_i v_i \quad B = 2E_k - \left(\frac{P}{N} \right) \sum_i v_i$$

Współczynniki wykorzystane do przeskalowania prędkości atomów:

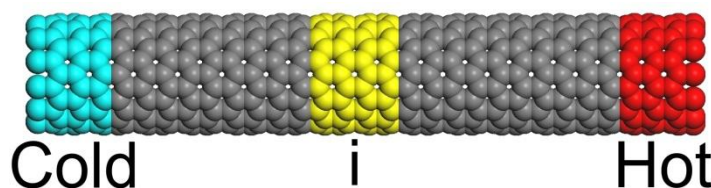
$$R = 1 + [-B + (B^2 + 4A\Delta E_k)]^{\frac{1}{2}} / 2A \quad v_{sub} = \frac{(R-1)\vec{P}}{Nm_i}$$

$$v_{new} = Rv_{old} - v_{sub}$$

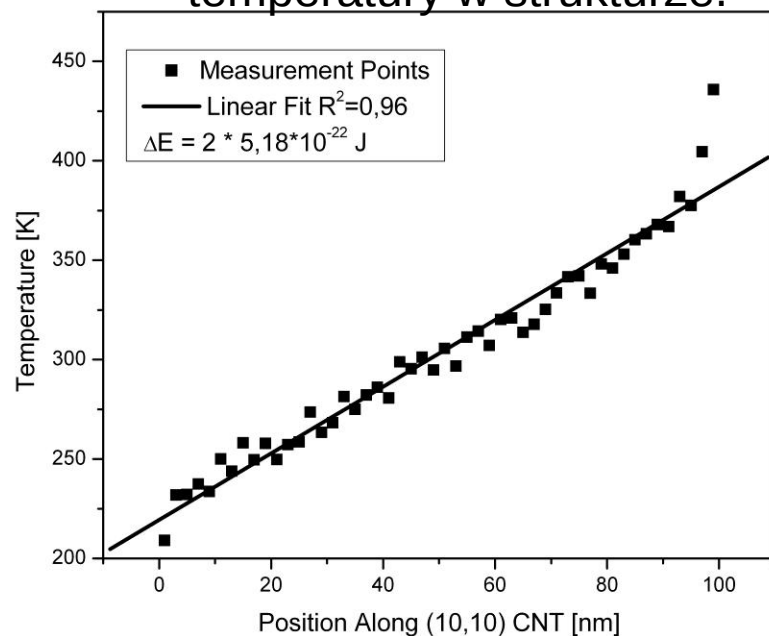
*Ikeshoji T., Hafskjold B., "Non-equilibrium Molecular Dynamics of Heat Conduction in Liquid and Through Liquid-Gas Interface", Molecular Phys. (1994), Vol. 81, No. 2, pp. 251-261.

Przykład wykonanych obliczeń - nanorurka węglowa

Model CNT z wyznaczonymi obszarami

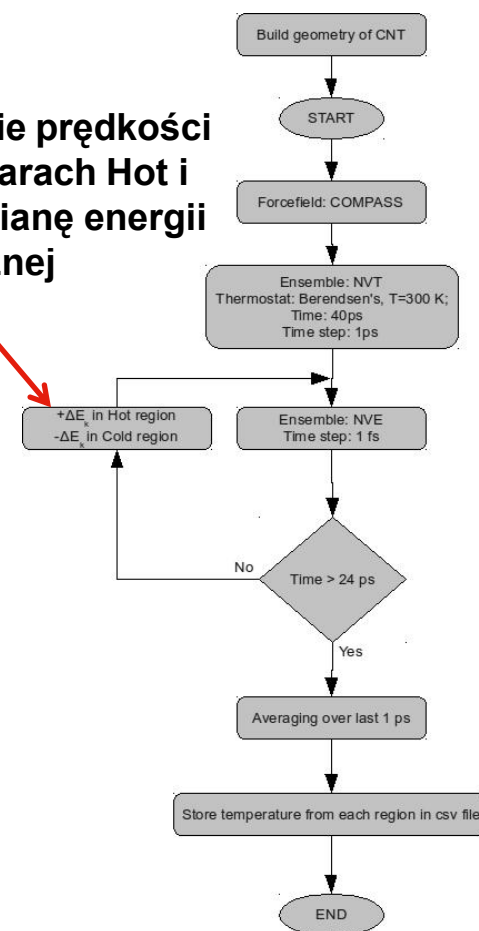


Wynik obliczeń: uzyskano gradient temperatury w strukturze.



Przeskalowywanie prędkości
atomów w obszarach Hot i
Cold poprzez zmianę energii
kinetycznej

Procedura obliczeniowa



Publikacje

- **Doniesienia konferencyjne:**

Platek B., Falat T., Felba J., *The impact of the number of walls on CNTs thermal conductivity - molecular dynamics approach*, 33rd International Conference of IMAPS - CPMT IEEE Poland, Szczecin 2009, s. 285-290

Falat T., Platek B., Felba J., *Molecular Dynamics Study of the Chiral Vector Influence on Thermal Conductivity of Carbon Nanotubes*, 11th Electronics Packaging Technology Conference, Singapore 2009, s.636-639

Platek B., Falat T., Felba J., *The impact of carbon nanotubes diameter on their thermal conductivity - non-equilibrium molecular dynamics approach*, 3rd Electronics Systemintegration Technology Conference, Berlin, 2010

Platek B., Falat T., Felba J., Borzdun A., *The Study of Carbon Nanotube's Length in Reference to Its Thermal Conductivity by Molecular Dynamics Approach*, 11th Int. Conf. on Thermal, Mechanical and Multiphysics Simulation and Experiments in Micro-Electronics and Micro-Systems, EuroSimE 2010, s.4

Platek B., Falat T., Felba J., *The influence of molecular dynamics simulation parameters on the accuracy of carbon nanotubes thermal conductivity calculations*, 12th Int. Conf. on Thermal, Mechanical and Multiphysics Simulation and Experiments in Micro-Electronics and Micro-Systems, EuroSimE 2011, Linz, Austria, 2011

Falat T., Platek B., Felba J., *Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Heat Transfer in Carbon Nanotubes - Verification and Model Validation*, 12th Int. Conf. on Thermal, Mechanical and Multiphysics Simulation and Experiments in Micro-Electronics and Micro-Systems, EuroSimE 2011, Linz, Austria, 2011

- **Rozdział w książce:**

Bartosz Platek, Tomasz Falat, Jan Felba , *Influence of Structural Parameters of Carbon Nanotubes on their Thermal Conductivity: Numerical Assessment*, zawarty w : *Molecular Modeling and Multiscaling Issues for Electronic Material Applications*, edytorzy: Nancy Iwamoto, Matthew M.F. Yuen, Haibo Fan, **Springer US**, 2012, New York

Projekt „Elastyczna elektronika”

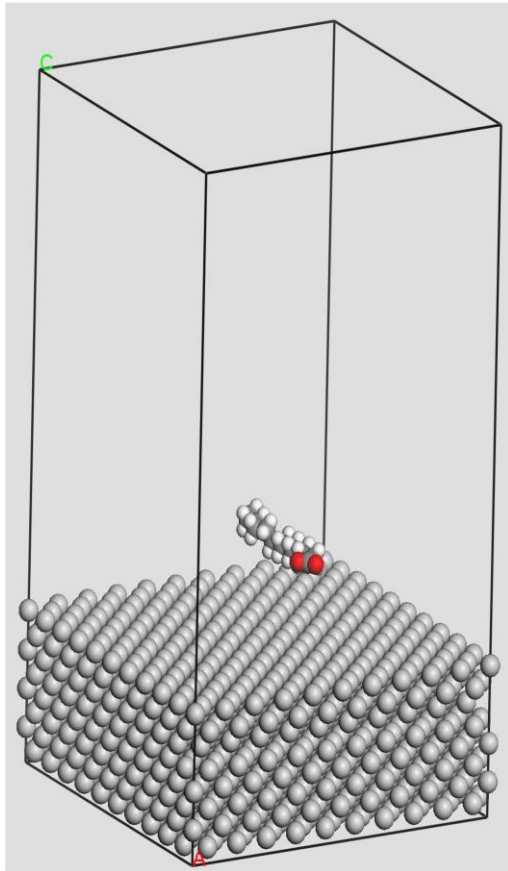
Projekt Narodowego Centrum Badań i Rozwoju.

Pełny tytuł projektu:

„Opracowanie technologii wytwarzania struktur elektrycznie przewodzących techniką Ink-Jet z wykorzystaniem cząstek srebra o rozdrobnieniu nanometrowym do zastosowań w elektronice elastycznej.”

Realizacja projektu: 2010 - 2013

Energia interakcji (ocena adhezji)



- Celem badań było wyznaczenie energii interakcji pomiędzy srebrem a cząstką ligandu, który stanowi warstwę chroniącą przed sedymentacją nanocząstek srebra w tuszu elektrycznie przewodzącym.
- Do obliczeń wykorzystano moduł Forcite w Materials Studio.
- Wyniki zaprezentowano na międzynarodowej konferencji:

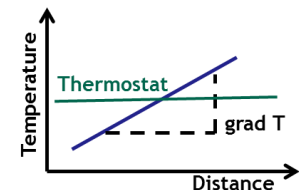
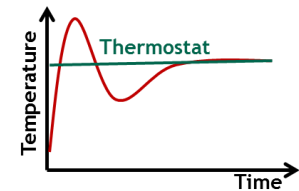
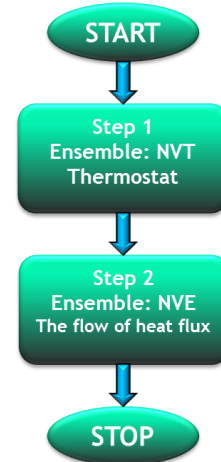
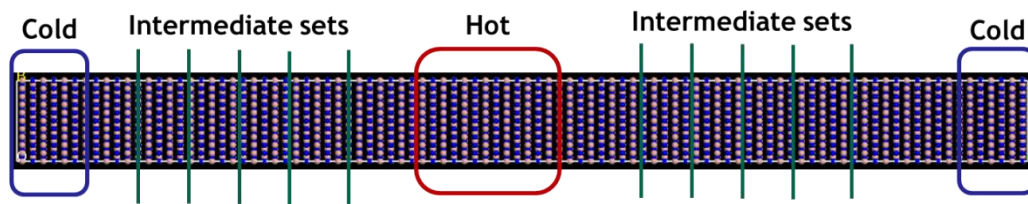
Fałat T., Płatek B., Felba J., ***Sintering Process of Silver Nanoparticles in Ink-Jet Printed Conductive Microstructures - Molecular Dynamics Approach***, 13th International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Microsystems, EuroSimE 2012, Lisbon

Projekt NanoTIM

- Projekt europejski.
- Tytuł projektu: **Development, characterization and reliability of high performance nano thermal interface materials for large power dissipation applications**
- Celem projektu jest opracowanie materiału o dużej przewodności cieplnej do zastosowań w montażu aparatury elektronicznej (kompozyty infiltrowane metalami)
- Realizacja projektu: 2012 - 2015

Prace prowadzone w ramach NanoTIM

- Doświadczenie zdobyte w dziedzinie modelowania molekularnego zaowocowało zaproszeniem do europejskiego projektu NanoTIM
- Cele naszego zespołu w projekcie :
 - oszacowanie przewodności cieplnej nanostruktur wykonanych z azotku boru (h-BN)



- oszacowanie adhezji pomiędzy poszczególnymi materiałami składającymi się na projektowany materiał



Politechnika Wrocławska

Dziękuję za uwagę

Kierownik: prof. Jan Felba

Jan.Felba@pwr.wroc.pl

Wydziałowy Zakład Technologii Aparatury Elektronicznej
Wydział Elektroniki Mikrosystemów i Fotoniki