

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
Навчально-науковий інститут екології, зеленої енергетики та сталого розвитку
Кафедра інформаційних технологій у відновлюваній енергетиці

До захисту допущено
Кафедрою інформаційних технологій у відновлюваній енергетиці протокол
№ _____ від _____

в.о. завідувача кафедри _____ Ілля МАРУЩЕНКО
(підпис) (ім'я, прізвище)

« _____ » _____ 2025 р.

Кваліфікаційна робота
здобувача Катерини САВІНОЇ другого (магістерського) рівня вищої освіти

Моделювання потоку тепла в провідниках прямокутного перерізу

(назва роботи)

Спеціальність (спеціалізація) 105 Прикладна фізика та наноматеріали
(код та найменування спеціальності; спеціалізації спеціальності - за наявності)

Освітня програма Інформаційні технології в енергетичних системах
(назва освітньої програми)

Виконавець _____ Катерина САВІНА
(підпис) (ім'я, прізвище)

Науковий керівник _____ Єгор НЕМЧЕНКО
(підпис) (ім'я, прізвище)

Харків – 2025

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Навчально-науковий інститут екології, зеленої енергетики та сталого розвитку

Кафедра інформаційних технологій у відновлюваній енергетиці

Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр

Спеціальність 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. завідувача кафедри

_____ Ілля МАНУЩЕНКО

(підпис)

“ _____ ” _____ 2025 року

ЗАВДАННЯ

НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Савіної Катерини Андріївни

1. Тема роботи «Моделювання потоку тепла в провідниках прямокутного перерізу» керівник роботи: Немченко Єгор Костянтинович, доцент кафедри. Затверджено наказом по університету від 25 листопада 2025 року № 3401-5/4196.
2. Строк подання студентом роботи 01.12.2025 р.
3. Перелік питань, які потрібно вирішити:
 - 1) Здійснити узагальнений аналіз наукових джерел, присвячених теоретичним і обчислювальним підходам до оцінки теплового перенесення у циліндричних провідних елементах з урахуванням їхнього масштабу та характеру поверхневої нерівності.
 - 2) Визначити й систематизувати ключові фізичні концепції, що описують механізми теплообміну в нанорозмірних об'єктах, беручи до уваги вплив форми провідників і властивостей їхніх межових шарів.

3) Представити удосконалені або нові математичні та комп'ютерні методики, придатні для розв'язання прикладних задач моделювання теплопереносу в наноструктурах із реальною мікрорельєфною поверхнею.

4. План роботи:

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Проведення огляду літератури щодо перенесення тепла в провідниках.
2	Вивчення теоретичних підходів до визначення характеристик циліндричних провідників, що впливають на продуктивність теплового перенесення.
3	Створення та застосування чисельних алгоритмів для моделювання теплових потоків з урахуванням геометричних параметрів провідників і рівня нерівності їхніх поверхонь.
4	Систематизація ключових фізичних принципів, які описують теплоперенос у структурах нанометрового масштабу.
5	Узагальнення підходів до підвищення теплопередачі, зокрема впливу форми провідників і властивостей їхніх межових шарів.
6	Реалізація вдосконалених методів розв'язання практичних задач термомоделювання.
7	Розроблення та апробація оновлених методів оцінювання параметрів теплоперенесення в наноструктурах із фактичною поверхневою шорсткістю.
8	Підготовка підсумкових висновків і формування переліку.

5. Дата видачі завдання: 03 листопада 2025 року.

Студент

підпис

Катерина САВІНА

Керівник роботи

підпис

Єгор НЕМЧЕНКО

РЕФЕРАТ

Катерина Савіна «Моделювання потоку тепла в провідниках прямокутного перерізу»

Кваліфікаційна робота магістра з прикладної фізики. – Х.: Харківській національний університет імені В. Н. Каразіна, 2025. – 50 с.

У роботі розглядається задача моделювання теплових потоків у провідниках прямокутного перерізу з урахуванням їхніх геометричних параметрів та властивостей поверхні.

У межах дослідження проведено систематичний аналіз наукових публікацій, присвячених оцінюванню теплопровідності у провідниках різної форми. В огляді підкреслено роль розмірних ефектів, геометрії перерізу та характеристик поверхневого мікрорельєфу в формуванні теплових потоків і теплових опорів. Сформульовано та узагальнено основні фізичні принципи, що визначають поведінку теплопереносу в нанорозмірних структурах.

Розроблено та адаптовано чисельні методи, придатні для моделювання теплових потоків у провідниках прямокутного перерізу з реальною поверхневою шорсткістю. Запропоновано підходи до параметризації нерівності поверхні та включення її впливу в граничні умови математичних моделей.

Результатом роботи є комплекс рекомендацій щодо вибору оптимальних моделей і чисельних алгоритмів для опису теплопереносу в нанорозмірних провідниках прямокутної форми з різним ступенем шорсткості поверхні. Отримані висновки створюють основу для підвищення точності прогнозування теплових режимів у сучасних елементах мікро- та наноелектроніки.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ТЕПЛОПЕРЕНОС; ПРЯМОКУТНИЙ ПРОВІДНИК; НАНОСТРУКТУРИ; ФОНОННЕ РОЗСИЮВАННЯ; ТЕПЛОВИЙ ОПІР; ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ.

ABSTRACT

Kateryna Savina. “Modeling of Heat Flow in Rectangular-Section Conductors.”

Master’s Thesis in Applied Physics. – Kharkiv: V. N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – 50 p.

This thesis addresses the problem of modeling heat flow in conductors with a rectangular cross-section, taking into account their geometric parameters and surface properties. The study includes a systematic analysis of scientific publications devoted to evaluating thermal conductivity in conductors of various shapes. The review highlights the influence of size effects, cross-section geometry, and surface microrelief characteristics on heat transport and thermal resistance. The fundamental physical principles governing heat transfer in nanoscale structures are formulated and summarized.

Numerical methods suitable for modeling heat flow in rectangular conductors with realistic surface roughness are developed and adapted. Approaches for parameterizing surface irregularities and incorporating their influence into the boundary conditions of mathematical models are proposed.

The outcome of the work is a set of recommendations for selecting optimal models and numerical algorithms for describing heat transfer in nanoscale rectangular conductors with varying degrees of surface roughness. The conclusions form a basis for improving the accuracy of thermal regime prediction in modern micro- and nanoelectronic components.

Keywords: HEAT TRANSFER; RECTANGULAR CONDUCTOR; NANOSTRUCTURES; PHONON SCATTERING; THERMAL RESISTANCE; NUMERICAL MODELING.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	7
РОЗДІЛ 1. ТЕПЛОПЕРЕНОС У НИЗЬКОРОЗМІРНИХ СТРУКТУРАХ.....	10
1.1. Мотивація дослідження теплопереносу у низькорозмірних структурах.....	11
1.2. Історичний контекст	12
1.3. Перенесення тепла у рідинах та газах.....	13
1.4. Перенесення тепла у наноструктурах	15
1.5. Висновок до розділу.....	17
РОЗДІЛ 2. МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛООБМІНУ У НАНОСТРУКТУРАХ.....	18
2.1. Вступ до розділу.....	18
2.2. Розмірні ефекти у теплопереносі.....	20
2.3. Причини виникнення розмірних ефектів теплопереносу.....	21
2.4. Класифікація методів моделювання теплопереносу на мікро- та нано- рівні.....	23
2.5. Моделювання теплопереносу з перших принципів.....	25
2.6. Висновок до розділу.....	27
РОЗДІЛ 3. ПОТОКИ ТЕПЛА ФОНОНІВ В СТРУКТУРАХ З ПРЯМОКУТНИМ ПЕРЕРІЗОМ.....	29
3.1. Вступ до розділу.....	29
3.2. Інтегральні рівняння для функції розподілу балістичних фононів.....	31
3.3. Інтегральні рівняння та їх чисельне розв'язання в дифузійному режимі	34
3.4. Інтегральні рівняння для конкретних форм та їх узагальнення на всі форми.....	35
3.5. Наближене аналітичне рішення для будь-якого поперечного перерізу та розмірів.....	39
3.6. Теплові потоки за наявності прикладеної різниці температур.....	43
3.7. Обговорення та висновки розділу	48
ВИСНОВКИ.....	49
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	50

ВСТУП

Актуальність теми.

Моделювання теплових потоків у провідниках прямокутного перерізу є важливою науковою та прикладною задачею, що безпосередньо пов'язана з розвитком сучасних технологій мікро- та наноелектроніки, сенсорних систем, теплових інтерфейсів і компонентів високої щільності інтеграції. Зі зменшенням розмірів елементів до мікро- та наномасштабів класичні дифузійні моделі теплопереносу перестають давати адекватний опис реальних процесів. Виникає необхідність урахування кінетичних механізмів перенесення, балістичної поведінки фононів, підвищеного впливу межових опорів і розсіювання на поверхневих неоднорідностях. Саме ці фактори визначають ефективність теплопровідності, стабільність теплових режимів та довговічність пристроїв нового покоління.

Особливу роль відіграє геометрія провідника. Прямокутний переріз, на відміну від циліндричного чи квадратного, характерний для значної частини реальних компонентів — тонких плівок, стрічкових з'єднань, мікроканальних теплообмінників, елементів мікросхем. У таких структурах співвідношення сторін, товщина та орієнтація поверхонь визначають конфігурацію теплових потоків і ступінь участі балістичних механізмів.

Актуальність роботи посилюється тим, що наявні моделі часто не враховують реальну геометрію та морфологію поверхні або роблять це у спрощеній формі. Розроблення й адаптація чисельних та аналітичних методів, здатних точно відображати ці фактори, є необхідною умовою для підвищення точності прогнозування теплових режимів у практичних застосуваннях. Створення достовірних моделей теплопереносу у прямокутних провідниках з реальною шорсткістю поверхні забезпечує можливість оптимізації конструкції теплових інтерфейсів, підвищення енергоефективності пристроїв та запобігання перегріванню елементів мікро- і наноелектроніки.

Основною метою роботи є розроблення, удосконалення та застосування аналітичних і чисельних методів моделювання теплопереносу в провідниках прямокутного перерізу з урахуванням їхніх геометричних параметрів та реальної поверхневої шорсткості. Для досягнення цієї мети передбачено проведення комплексного аналізу традиційних і сучасних підходів до опису теплових процесів, дослідження впливу розмірних ефектів, межових опорів та механізмів фононного розсіювання. Особлива увага приділяється створенню моделей, здатних точно відтворювати балістичні й дифузійні режими перенесення енергії в наноструктурах. Результатом роботи має стати

формування рекомендацій щодо вибору оптимальних методів моделювання та параметризації поверхневих неоднорідностей для забезпечення надійного прогнозування теплових режимів у реальних мікро- та нанoeлектронних системах.

Об'єкт дослідження: Процеси теплопереносу в провідниках прямокутного перерізу різних розмірів та з різними характеристиками поверхні, включно з наноструктурами.

Предмет дослідження: Аналітичні та чисельні методи моделювання теплових потоків у цих провідниках з урахуванням реальної шорсткості поверхні та геометричних параметрів.

Методи дослідження. У роботі використано комплекс аналітичних та чисельних методів, включаючи чисельне моделювання за допомогою методів молекулярної динаміки та Монте-Карло, параметризацію та врахування шорсткості поверхні в граничних умовах моделей, а також порівняння з експериментальними даними для валідації результатів.

Наукова новизна одержаних результатів . У роботі вперше проведено комплексне моделювання теплопереносу в провідниках прямокутного перерізу з реальною поверхневою шорсткістю, що дозволяє врахувати вплив мікрорельєфу на локальні та інтегральні теплові характеристики. Розроблено та адаптовано аналітичні формули, здатні описувати балістичні режими перенесення енергії в наноструктурах. Вперше здійснено систематизацію кінетичних і мезоскопічних ефектів у прямокутних провідниках різних розмірів із реальною шорсткістю поверхні. Встановлено взаємозв'язок між геометричними параметрами провідників, характеристиками поверхні та ефективністю теплопереносу. Вперше одержано рекомендації щодо вибору оптимальних моделей та алгоритмів для прогнозування теплових режимів у практичних мікро- та нанoeлектронних системах. Нові результати дозволяють підвищити точність моделювання та ефективність проектування теплових інтерфейсів у сучасних технологіях.

Практичне значення отриманих результатів.

Проведене у дипломі дослідження забезпечує такі результати

1. Дає можливість точного прогнозування теплових режимів у провідниках прямокутного перерізу з реальною поверхневою шорсткістю.
2. Дозволяє підвищити ефективність проектування теплових інтерфейсів і запобігати перегріванню компонентів у мікро- та нанoeлектроніці.
3. Сприяє оптимізації геометричних параметрів провідників для досягнення необхідної теплопровідності та надійності пристроїв.
4. Дає можливість адаптувати аналітичні та чисельні методи до конкретних технологічних умов і масштабів.

5. Використання розроблених моделей підвищує енергоефективність та стабільність роботи сучасних електронних систем.
6. Може застосовуватися при проектуванні мікропроцесорів, сенсорних систем, тонкоплівкових і стрічкових провідників, де критично важливий контроль теплових потоків.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 50 сторінок, із них основного тексту 43 сторінок, 10 рисунків за текстом, список використаних джерел із 20 найменувань на 1 сторінці.

РОЗДІЛ 1. ТЕПЛОПЕРЕНОС У НИЗЬКОРОЗМІРНИХ СТРУКТУРАХ

У цій роботі досліджується балістичний перенос тепла фононами за умов дифузного розсіювання на бічних стінках діелектричних наноструктур. Спираючись на підхід, розроблений Клаузінгом [1] для моделювання потоку частинок у трубці, ми формуємо узагальнену модель фононного транспорту, у якій вздовж зразка задається інтегральне рівняння для густини енергетичного потоку фононів. Це рівняння описує, яким чином енергія переноситься від нагрівача до холодильника за умов багаторазового дифузного розсіювання на внутрішніх стінках. Запропоноване нами рівняння розв'язується як чисельно, так і аналітично, що дає змогу детально проаналізувати вплив геометрії та граничних умов на балістичний перенос тепла.

Розглядаються три типи геометрій: стрижні з прямокутним перерізом, структури з круглим перерізом та двовимірні стрічки. На відміну від класичної моделі Казіміра [2], де передбачається нескінченно довгий зразок і фіксований лінійний температурний градієнт, ми аналізуємо більш фізично реалістичну ситуацію — зразок скінченної довжини з фіксованими температурами на кінцях. Показано, що така постановка призводить до суттєвих відмінностей у температурному профілі, середній довжині вільного пробігу та ефективній теплопровідності порівняно з класичною моделлю.

Особливу увагу приділено формуванню сталого нелінійного температурного профілю, що виникає навіть у балістичній межі, а також залежності теплопровідності від довжини структури — ефект, добре відомий у наноструктурах і часто пов'язаний зі зменшенням розмірів до наномасштабів. Хоча у статті аналізуються переважно умови чисто дифузного розсіювання, модель легко узагальнюється на змішане (спекулярно-дифузне) розсіювання, що відповідає реальним умовам поверхонь наноструктур.

Наше дослідження формує цілісну фізичну картину балістичного теплопереносу у структурах, розміри яких порівнянні або менші за довжину вільного пробігу фононів, і може бути застосоване для аналізу теплових процесів у нанодротах, нанострічках, тонких мембранах та інших низькорозмірних системах.

1.1. Мотивація дослідження теплопереносу у низькорозмірних структурах

Вивчення теплових властивостей наноструктур є однією з центральних задач сучасної фізики конденсованих середовищ, нанофізики та термоінженерії. За низьких температур, коли взаємодія фононів між собою слабшає, перенос тепла набуває **балістичного характеру**, тобто енергія переноситься без розсіяння всередині об'єму матеріалу; взаємодія має місце лише на межах. Це різко контрастує з дифузійним режимом, типовим для масивних кристалів при високих температурах.

У таких умовах тепловий потік визначається:
випромінювальними властивостями нагрівача і холодильника,
характером відбиття фононів від бічних стінок,
геометрією провідника (форма поперечного перерізу, товщина, відношення довжина/ширина).

Саме тому балістичний теплоперенос є критично важливим як для фундаментальної науки, так і для застосувань — зокрема, у квантових сенсорах, наномеханічних резонаторах, термоелектричних пристроях та системах кріогенного охолодження.

Однією з найвідоміших класичних робіт у цій галузі є дослідження Казимира (Casimir, 1938) [2], який уперше показав, що задача про фононний теплоперенос в умовах **дифузного відбиття** формально еквівалентна задачі кінетичної теорії про рух розрідженого газу у режимі Кнудсена [3]. Така аналогія і сьогодні лежить в основі більшості моделей балістичного переносу.

У класичній моделі Казимира передбачається:
нескінченна довжина провідника,
лінійний температурний градієнт, заданий зовнішніми умовами,
стаціонарний потік фононів, що розсіюються тільки на бічних поверхнях.

Пізніше Клаузінг [1] значно узагальнив задачу, розглянувши перенесення частинок через трубку **скінченної довжини**, на кінцях якої фіксовано різні значення тиску. Це призвело до появи інтегрального рівняння, що пов'язує температуру на межах із потоком частинок усередині об'єму. Саме цей формалізм згодом було застосовано до проблеми балістичного фононного переносу у роботах [4–6].

1.3. Два типи постановки задачі

У літературі існує два принципово різні формулювання задачі:

(А) Підхід Казимира–Зімана–Маріса [2, 7, 8]

температура змінюється *лінійно* вздовж нескінченного провідника,

градієнт є зовнішньо заданим,
тепловий потік є пропорційним цьому градієнту.

(В) Підхід зі зразком скінченної довжини (Клаузінг [1], Perlmutter [5], Klistner [4], наші роботи [9, 10])

температура *фіксована на кінцях* зразка,
температурний профіль **самовстановлюється**,
тепловий потік визначається розв'язком інтегрального рівняння.

Ця різниця має фундаментальне значення: у другому випадку теплопровідність стає *ефективною* та залежить від довжини зразка, що критично для наноструктур.

1.2. Історичний контекст

Теплоперенос є одним із фундаментальних фізичних процесів, який визначає поведінку матерії в надзвичайно широкому діапазоні масштабів — від атомного рівня до макроскопічних систем. Універсальність теплопереносу полягає в тому, що майже всі реальні фізичні процеси супроводжуються передачею енергії від області з вищою температурою до області з нижчою. Незалежно від того, чи мова йде про розсіювання теплоти у металічному стрижні, теплові потоки у товстих шарах атмосфери, повільне вирівнювання температури у рідких середовищах або надзвичайно швидкі енергетичні процеси у наноструктурах, у всіх випадках фундаментальний механізм пов'язаний з несиметричним розподілом енергії та прагненням системи перейти до більш рівноважного стану.

У твердих тілах теплоперенос визначається їхньою внутрішньою будовою, міцністю міжатомних зв'язків, типом кристалічної ґратки та наявністю дефектів. У добре впорядкованих кристалах основним носієм тепла виступають колективні збудження — фонони, які можна уявити як квазічастинки, що відображають коливання атомів ґратки. Саме фононні процеси відповідають за передачу енергії у непровідних або слабкопровідних матеріалах. Коли температурний градієнт прикладений уздовж твердого тіла, енергія переноситься через взаємодії цих коливань, які поширюються через кристалічну структуру. Розсіювання фононів на інших фононах, дефектах, домішках або межах зерен визначає ефективність теплопровідності. Чим чистіший і досконаліший кристал, тим довше фонони можуть поширюватися без зіткнень, забезпечуючи високу теплопровідність. Тому кристалічний кремній чи алмаз демонструють значно більше значення теплопередачі, ніж аморфні матеріали чи полімери, де хаотичність структури суттєво обмежує вільний рух фононів.

У металах ситуація відрізняється. Хоча фононний вклад залишається важливим, домінує електронний механізм. Вільні електрони, які одночасно відповідають за електропровідність, є також головними носіями теплової енергії. Через високу рухливість та здатність переносити енергію на значні відстані електронний внесок забезпечує великий коефіцієнт теплопровідності металів. Саме тому мідь або срібло є одними з найкращих промислових теплопровідників. Важливо підкреслити, що електронний рух у металах тісно пов'язаний із розсіюванням на фонах, домішках та дефектах ґратки. Коли температура зростає, амплітуда фононних коливань збільшується, спричиняючи сильніше розсіювання електронів. Це призводить до зниження теплопровідності, що чітко проявляється в більшості металів при переході до високих температур.

У твердих тілах важливу роль відіграють також структурні неоднорідності: межі зерен, дислокації, вакансії, домішки, аморфні вставки. У наноструктурованих матеріалах, де розмір структурних елементів стає порівнянним із середньою довжиною пробігу фононів або електронів, їхній вплив стає домінуючим. Такі структури можуть суттєво зменшувати теплопровідність, блокуючи перенос енергії, що використовується для створення термоелектричних матеріалів з високою ефективністю перетворення тепла на електрику.

1.3. Перенесення тепла у рідинах та газах

Розглядаючи теплоперенос у рідинах, слід пам'ятати, що структура та динаміка рідких середовищ радикально відрізняються від твердих. Хоча між молекулами рідини існують міжмолекулярні сили, вони значно слабші та менш регулярні, ніж у твердих тілах. Молекули рідини рухаються хаотично, часто переміщуються, перекочуються та перетасовуються. Внаслідок цього теплоперенос у рідинах визначається як мікроскопічним хаотичним рухом молекул, так і макроскопічними явищами, зокрема конвекцією, яка може суттєво переважати теплопровідність.

Класичні рідини, такі як вода, органічні розчинники, масла, характеризуються здебільшого рухом теплової енергії за рахунок міжмолекулярних зіткнень. Але важливим є й той факт, що рідини здатні переміщати масу, що призводить до появи конвективних потоків. У випадку природної конвекції різниця температур спричиняє різницю густини, через що тепле середовище піднімається вгору, а холодне опускається вниз, утворюючи складну мережу потоків, яка часто забезпечує набагато ефективніший перенос енергії, ніж проста теплопровідність. У технічних

застосуваннях, зокрема в теплообмінниках, реакторах чи охолоджувальних системах, переважає саме конвективний перенос, який дозволяє передавати тепло на значні відстані та з великою швидкістю.

Особливе місце серед рідин займають надплинні фази, такі як гелій II. У таких середовищах теплоперенос має унікальні властивості, що не мають аналогів у звичайних рідинах: виникають другий звук — хвиля температури, надзвичайно велика теплопровідність, квазічастинки з відмінною динамікою, а також складні механізми взаємодії між нормальним і надплинним компонентами. Хоча в нашому тексті ми не зосереджуємося на деталях квантових рідин, важливо наголосити, що гелій II демонструє найефективніший теплоперенос серед усіх відомих рідин, що пов'язано з колективними квантовими явищами.

У газах механізм теплопереносу ґрунтується на кінетичній теорії, де молекули рухаються практично вільно між зіткненнями. Передача енергії відбувається через зіткнення молекул, які переносять імпульс і внутрішню енергію. У порівнянні з рідинами та твердими тілами гази мають значно меншу густину, тому зіткнення між частинками відбуваються рідше, а теплопровідність у більшості газів є низькою. Однак це правило не завжди однозначне: легкі гази, такі як водень або гелій, мають відносно високу теплопровідність через швидкий рух молекул і низьку масу. Зі збільшенням температури теплопровідність газів зростає, оскільки частинки рухаються швидше, що збільшує частоту зіткнень.

У розріджених газах, коли середня довжина вільного пробігу молекул стає порівнянною з геометричними розмірами системи, теплоперенос набуває нетрадиційних характеристик. У таких умовах класичні підходи перетворюються на неадекватні, оскільки молекули здійснюють менше зіткнень між собою і частіше взаємодіють із поверхнями. Саме такі явища є важливими у вакуумній техніці, мікроелектроніці, космічних застосуваннях, а також у нанотрубках, наноканалах і мікрофлюїдних пристроях.

Якщо співставити теплоперенос у твердих тілах, рідинах і газах, стає очевидним, що ці три агрегатні стани демонструють принципово різні механізми передачі енергії. У твердих тілах ключовими є колективні коливання та електронні процеси; у рідинах енергія переноситься через хаотичний рух частинок і часто доповнюється конвекцією; у газах перенос визначений кінетикою окремих молекул. Проте в сучасній фізиці часто доводиться працювати з системами, які не можна однозначно віднести до жодного з цих класів — із наноструктурами, тонкими плівками, композитними матеріалами, гетерогенними багатошаровими системами та квантовими структурами.

1.4. Перенесення тепла у наноструктурах

Перейдемо до теплопереносу в наноструктурах, який належить до найбільш складних та цікавих розділів сучасної фізики. При зменшенні розмірів системи до нанометрового масштабу класичні уявлення про теплопередачу перестають працювати. Фонони вже не можуть розглядатися як хвилі, що вільно поширюються на великі відстані, адже їх рух обмежений нанометровими розмірами об'єкта. При цьому фонони масово розсіюються на межах, поверхнях та неоднорідностях, що призводить до різкого зниження теплопровідності. Цей ефект особливо помітний у тонких плівках, нанопровідниках, нанодротах і квантових точках. Наприклад, кремнієва плівка товщиною кілька десятків нанометрів може мати теплопровідність, що у кілька разів менша, ніж у об'ємного кремнію. У нанодротах теплопровідність може впасти на порядок і навіть більше.

У наноструктурах виникають також унікальні режими переносу, включаючи баллістичний теплоперенос, коли фонони рухаються практично без зіткнень, виконуючи роль квазічастинок із довгими траєкторіями. В таких системах температура перестає бути локальним параметром, а тепловий потік залежить від умов на межах і характеристик фононного спектра. Деякі наноструктури демонструють теплову діодну поведінку: тепловий потік може залежати від напрямку передачі енергії, подібно до електричного струму в діоді. Інші наноструктури показують так званий шумний або стохастичний перенос, коли флуктуації температури відіграють істотну роль, а середня поведінка системи формується сукупністю хаотичних мікроскопічних процесів.

Особливе значення в нанорозмірних системах має взаємодія фононів з поверхнею. Коли фонон досягає межі наноструктури, він може розсіюватися дзеркально або дифузно. Дзеркальне розсіювання зберігає напрям поширення хвилі, тоді як дифузне повністю руйнує інформацію про початковий рух. Чим шорсткіша поверхня, тим більша частка дифузного розсіювання. У реальних наноструктурах поверхні майже завжди мають скінченну шорсткість, що приводить до домінування дифузних розсіювань і зниження теплопровідності. Цей ефект робить теплоперенос у нанорозмірних матеріалах чутливим до технології виготовлення, методів травлення, осадження та полірування. У нанокомпозитах або багатошарових матеріалах межі між різними шарами створюють додаткові термічні опори, які відіграють ключову роль у загальному тепловому балансі.

Ще одним цікавим аспектом теплопереносу в наноструктурах є роль спектрального розподілу фононів. У макроскопічних системах зазвичай розглядається усереднена теплопровідність. Але у наноструктурах різні фонони взаємодіють із розмірами системи по-різному: низькочастотні фонони з великими довжинами хвиль можуть частково передаватися через межі, тоді як високочастотні фонони ефективно розсіюються. У результаті ефективний тепловий потік визначається складною суперпозицією внесків від різних частотних груп. Саме тому моделювання теплопереносу в наноструктурах часто вимагає врахування спектральної залежності, тоді як класична макроскопічна фізика обходиться без цього.

Важливо також зазначити, що у наноматеріалах теплоперенос неможливо відділити від електронного, оптичного, механічного або квантового контексту. У квантових точках, надрешітках, наноплівках або одновірних нанодротах тепловий баланс залежить не лише від фононних механізмів, а й від електронних переходів, тунельних явищ, плазмонних мод і навіть локальних електромагнітних коливань. У деяких наноструктурах з'являються поверхневі фонон-поляритони або плазмон-поляритони, які здатні переносити енергію на відстані, набагато більші, ніж звичайні фонони. Також слід враховувати, що в нанорозмірних матеріалах теплові флуктуації можуть бути зіставними з середніми значеннями температури, через що температура як термодинамічний параметр набуває статистичного характеру.

У наноструктурах критичною стає проблема теплового контакту між різними матеріалами. На межі між двома середовищами виникає термічний опір, пов'язаний із тим, що фонони одного матеріалу не можуть ефективно передавати енергію фононам іншого через невідповідність спектрів. Цей феномен проявляється у вигляді капіцінського опору. У макроскопічних системах він часто не суттєвий, але в наноструктурах межі можуть становити значну частину об'єму, тому їхній внесок стає домінуючим і визначає загальний тепловий потік.

Таким чином, теплоперенос є надзвичайно багатогранним явищем, яке охоплює численні фізичні механізми і залежить від структури, геометрії, агрегатного стану, мікроскопічних процесів та масштабів. У твердих тілах переважають фононні та електронні процеси, в рідинах ключовими виступають хаотичний рух молекул та конвекція, а в газах перенос визначається кінетичною природою частинок. У наноматеріалах ці механізми переплітаються, створюючи нові режими, які не можна пояснити в рамках традиційних підходів. Розуміння всіх цих аспектів є основою для створення сучасних теплових технологій — від мікроелектроніки та термоелектрики до

охолодження квантових систем та розробки матеріалів з контрольованою теплопровідністю.

1.5. Висновок до розділу

Розглянуті фізичні механізми теплопереносу в твердих тілах, рідинах, газах та наноструктурованих матеріалах демонструють, наскільки різноманітним і багат шаровим може бути перенос енергії залежно від природи середовища та масштабів системи. У твердих тілах теплоперенос визначається взаємодією фононів, конфігурацією кристалічної ґратки, впливом дефектів та, у випадку металів, рухом електронного газу. У рідинах основна роль належить хаотичному мікроскопічному руху молекул, доповненому макроскопічною конвекцією, яка здатна кардинально змінювати характер теплових процесів. У газах перенос енергії базується на кінетичних зіткненнях частинок, а їхня мала густина робить процеси теплопровідності чутливими до температури, тиску та ступеня розрідження середовища.

Особливої уваги заслуговують наноструктури, де класичні уявлення про теплоперенос перестають бути достатніми. На наномасштабі визначальним фактором стає геометричне обмеження руху фононів та електронів, розсіювання на поверхнях і межах, спектральні особливості коливань, а також квантові ефекти, що відсутні в макроскопічних системах. У цих умовах теплоперенос може ставати балістичним, спектрально залежним або асиметричним, а термічний опір межі — визначальним параметром. Така поведінка відкриває нові можливості для цілеспрямованого керування тепловими потоками, але водночас створює складні наукові та інженерні виклики.

Таким чином, теплоперенос є універсальним, але водночас надзвичайно чутливим до структури, агрегатного стану та масштабу явищем. Глибоке розуміння його механізмів у різних середовищах є фундаментально важливим не лише для класичної фізики твердого тіла, гідродинаміки чи газової кінетики, але й для сучасних технологій, включаючи мікро- та нанoeлектроніку, кріогенну техніку, теплоенергетику та матеріалознавство. Узагальнення фізичних принципів теплопереносу дозволяє створювати більш ефективні матеріали й пристрої та відкриває шлях до розробки систем із керованими тепловими властивостями, що є особливо важливим для сучасних наукових і прикладних задач.

РОЗДІЛ 2. МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛООБМІНУ У НАНОСТРУКТУРАХ

2.1. Вступ до розділу

Моделювання теплообміну на мікро- та нано-масштабах є надзвичайно актуальною науково-технічною проблемою через стрімкий розвиток сучасних технологій і тенденцію до мініатюризації електронних, фотонних, оптичних та енергетичних пристроїв. Сучасна мікро- та наноелектроніка вимагає високої щільності інтеграції компонентів, що призводить до зростання теплової потужності та навантаженості на одиницю об'єму. Традиційні макроскопічні моделі теплопереносу, зокрема класичний закон Фур'є, добре працюють у великих системах, але на наномасштабах вони перестають адекватно описувати поведінку теплового потоку. Це зумовлено появою нових фізичних ефектів: балістичного та напівбалістичного переносу фононів, хвильових властивостей коливальних мод, великої довжини вільного пробігу, суттєвого впливу меж і інтерфейсів на тепловий потік. Таким чином, механізми переносу тепла змінюються, а традиційні дифузійні моделі не забезпечують потрібної точності.

Експериментальне вивчення теплопереносу на мікро- та наномасштабі обмежене низкою факторів. Вимірювання мають похибки через обмеження точності апаратури, термічні флуктуації, дефекти матеріалу та неоднорідності поверхні. Локалізація теплового потоку на наномасштабі ускладнює отримання надійних даних, а навіть незначні зміни геометрії чи матеріалу можуть призвести до суттєвих відмінностей у результатах. Через це чисельні та аналітичні методи моделювання стають основним інструментом для аналізу та прогнозування теплових процесів у наноструктурах і тонкоплівкових провідниках.

Сучасні чисельні методи включають first-principles моделювання на основі Boltzmann Transport Equation (BTE), Molecular Dynamics (MD), Non-Equilibrium Green's Function (NEGF), а також чисельне розв'язування фононного BTE. Вони дозволяють оцінювати внесок окремих фононних мод, довжини вільного пробігу, хвильові ефекти, вплив домішок, дефектів, межових опор і міжфазних переходів, що неможливо зробити експериментально або дуже складно. Такі підходи надають детальне розуміння процесів переносу тепла на мікро- і нанорівнях, що є ключовим для розробки високоефективних матеріалів та технологій.

Особливе значення має врахування геометрії провідників і характеристик їхніх поверхонь. Провідники прямокутного перерізу широко використовуються в мікроелектронних пристроях, тонкоплівкових покриттях, стрічкових інтерконектах і мікроканальних теплообмінниках.

Геометричні параметри, такі як товщина, ширина і орієнтація перерізу, суттєво впливають на тепловий потік, а мікрорельєф і шорсткість поверхні визначають інтенсивність фононного розсіювання. Включення цих характеристик у математичні моделі дозволяє отримати більш точні результати, що важливо для прогнозування теплових режимів у сучасних наноструктурах.

Історично, дослідження теплопереносу в тонких провідниках розпочалося з класичних аналітичних рішень рівнянь теплопровідності з граничними умовами релаксації. Надалі були розроблені кінетичні підходи для опису балістичного і напівбалістичного переносу, які дозволяють враховувати довжину вільного пробігу фононів. У сучасних роботах активно застосовуються чисельні методи, включаючи Molecular Dynamics для моделювання атомно-молекулярної взаємодії та розв'язання Boltzmann Transport Equation для фононного переносу. NEGF дозволяє моделювати теплові потоки у квантових наноструктурах, де хвильові ефекти і міжфазні взаємодії мають критичне значення. Використання цих методів разом з параметризацією шорсткості поверхні та урахуванням реальних межових умов забезпечує високу точність прогнозів.

Розуміння механізмів теплопереносу на мікро- і наномасштабі є критично важливим для розвитку високоефективних матеріалів і технологій. Серед ключових напрямів застосування — сучасні мікроелектронні пристрої, системи теплового менеджменту, термоелектричні матеріали, теплові діоди, теплові “невидимки”, нанокомпозити і 2D матеріали (графен, VAs тощо). Точне керування тепловими потоками дозволяє підвищити ефективність, стабільність і довговічність компонентів, що є критично важливим для сучасної мікро- та наноелектроніки.

Особливу увагу у роботі приділено методологічному підходу до моделювання. Розроблено та адаптовано аналітичні формули для опису балістичних і дифузійних режимів теплопереносу, враховано межові опори (Kapitza resistance), неоднорідності поверхні та вплив геометричних обмежень. Чисельні алгоритми (MD, NEGF) інтегрують параметризацію шорсткості та вплив поверхні у граничні умови моделей. Валідація результатів здійснювалась за допомогою чутливісного аналізу та порівняння з експериментальними даними, що дозволило оцінити ефективність методів для реальних наноструктур.

Таким чином, актуальність теми визначається одночасно потребою точного опису теплопереносу на наномасштабі, зростаючими технологічними вимогами та обмеженням традиційних підходів. Розробка сучасних моделей і чисельних методів для симуляції теплових процесів у

мікро- і наноструктурах є важливою науково-технічною задачею, що створює основу для підвищення точності прогнозування теплових режимів, оптимізації конструкцій теплових інтерфейсів і вдосконалення матеріалів у сучасній мікро- та наноелектроніці.

2.2. Розмірні ефекти у теплопереносі

Розмірні ефекти, або size effects, у теплопереносі виникають тоді, коли фізичні розміри матеріалу стають порівнянними з характерними довжинами фононів, зокрема з довжиною їх вільного пробігу та довжиною хвильових коливань. У таких умовах фонони не зазнають достатньої кількості розсіювань всередині об'єму матеріалу, що призводить до того, що теплоперенос перестає бути виключно дифузійним, як передбачає класичний закон Фур'є. Тепловий потік на наномасштабі визначається не лише властивостями самої кристалічної решітки, а й взаємодією фононів із межами, дефектами, міжфазними переходами та інтерфейсами. Ці взаємодії можуть суттєво змінювати характер переносу тепла та його ефективність.

При зменшенні розмірів системи до мікро- і наномасштабів спостерігається поступовий перехід від дифузійного режиму теплопереносу до балістичного, коли фонони проходять значні відстані без внутрішніх розсіювань, а в деяких випадках виникають змішані режими, які поєднують дифузійні та балістичні характеристики. У таких умовах теплопровідність стає сильно залежною від розмірів і геометрії провідника, що робить неможливим використання класичних макроскопічних моделей без внесення коригувальних факторів. Наприклад, у тонких плівках і нанопровідниках товщина шару може бути менша за середню довжину вільного пробігу фононів, що призводить до зниження ефективної теплопровідності порівняно з об'ємним матеріалом.

Особливе значення розмірних ефектів проявляється в наноструктурованих матеріалах та 2D-системах. У графені, боровому арсеніді (BAs), нанопровідниках та квантових точках механізми теплопереносу істотно відрізняються від макроскопічних тіл: довгі фононні моди, мало розсіювання всередині об'єму та сильний вплив границь призводять до анізотропії теплового потоку та нелінійної залежності теплопровідності від розмірів структури. В тонкоплівкових матеріалах і стрічкових провідниках прямокутного перерізу вплив межових опор і поверхневої шорсткості стає ключовим фактором, що визначає тепловий режим і ефективність теплопередачі.

Для точного моделювання таких систем необхідно враховувати не тільки геометричні параметри, а й статистичні характеристики шорсткості поверхні, спектральний розподіл фононів і їх взаємодії з дефектами та домішками. Чисельні методи, такі як Molecular Dynamics, розв'язування фононного рівняння Больцмана (BTE), Non-Equilibrium Green's Function (NEGF), дозволяють врахувати ці фактори й отримати прогнозовані значення теплопровідності для конкретних наноструктур, що неможливо зробити експериментально.

Таким чином, аналіз size effects є обов'язковим при моделюванні теплових процесів у сучасних наноматеріалах, тонких плівках, нанопровідниках та 2D-структурах, де масштаб і геометрія безпосередньо впливають на механізми переносу енергії. Врахування розмірних ефектів дозволяє не тільки підвищити точність прогнозів теплових характеристик, а й оптимізувати конструкцію матеріалів та пристроїв для підвищення їх ефективності і надійності у мікро- і нанoeлектроніці, а також у сучасних енергетичних і фотонних системах.

2.3. Причини виникнення розмірних ефектів теплопереносу

Розмірні ефекти у теплопереносі на мікро- та нано-рівні виникають через зміну фізичних механізмів переносу теплової енергії, коли характерні геометричні розміри об'єкта стають порівнянними з довжинами фононних процесів, що визначають поведінку теплового потоку. Основними причинами виникнення size effects є наступні фактори.

2.3.1. Порівнянність розмірів структури з довжиною вільного пробігу фононів. У макроскопічних матеріалах фонони багаторазово розсіюються усередині об'єму, що забезпечує дифузійний характер теплопереносу та можливість застосування закону Фур'є. Класичне дифузійне моделювання працює за рахунок статистичного усереднення ефектів фононного розсіювання. Проте при зменшенні розмірів зразка до співрозмірних із середньою довжиною вільного пробігу фононів теплоперенос переходить у балістичний режим. У цьому випадку тепловий потік уже не залежить від об'єму матеріалу, а визначається інтенсивністю взаємодії фононів з границями структури. Така зміна механізму проявляє себе, наприклад, у тонких плівках та нанострічках, де товщина шару може бути меншою за середню довжину пробігу фононів, що призводить до зниження ефективної теплопровідності порівняно з об'ємним матеріалом.

2.3.2. Порівнянність розмірів структури з довжиною хвилі фононів

При ще менших масштабах, коли розміри структури наближаються до довжини хвилі фононів, виникають хвильові та когерентні властивості теплових коливань. У таких умовах фонони перестають поводитися виключно як частинки, і теплоперенос починає підкорятися квантово-хвильовим законам. Ці ефекти проявляються через інтерференцію хвиль, когерентний розподіл енергії та формування стоячих хвиль, що значно змінює локальне розподілення тепла. Класичні дифузійні моделі не можуть врахувати такі когерентні та хвильові явища, тому для опису теплопереносу необхідно використовувати методи, що базуються на квантовій механіці та хвильовій фізиці, такі як розв'язання фононного рівняння Больцмана (BTE) з хвильовими поправками або підхід Non-Equilibrium Green's Function (NEGF).

2.3.3. Вплив міжфазних та поверхневих границь На мікро- та наномасштабі кількість межових переходів і площа поверхні на одиницю об'єму матеріалу суттєво зростають. Кожна границя або інтерфейс створює додатковий тепловий опір, відомий як Kapitza resistance, який може стати домінуючим чинником у загальному теплопереносі. Інтенсивність розсіювання фононів на межах залежить від властивостей інтерфейсів, різниці акустичних імпедансів, а також від шорсткості та хімічного складу поверхні. У багатошарових наноструктурах, тонкоплівках та композитних матеріалах кількість меж значно перевищує об'ємні розсіювальні ефекти, тому властивості поверхні та їх щільність стають критично важливими для точного опису теплового потоку.

2.3.4. Сумарний вплив size effects на механізм тепло переносу Таким чином, при зменшенні геометричних розмірів матеріалу відбувається перехід від класичного дифузійного режиму до балістичного та змішаного режиму теплопереносу, а також проявляються когерентні та хвильові ефекти. Фонони перестають взаємодіяти лише усередині об'єму, а межові, поверхневі та квантові фактори стають визначальними. Це призводить до суттєвої зміни фізичної картини теплопереносу та робить необхідним застосування спеціальних моделей і чисельних методів, які враховують співвідношення розмірів об'єкта, довжини вільного пробігу та хвильових характеристик фононів.

2.3.5. Практичне значення розуміння причин size effects Вивчення причин виникнення size effects має ключове значення для проектування сучасних наноматеріалів та мікроелектронних пристроїв. Це дозволяє

передбачати ефективність теплопередачі в нанопровідниках, тонких плівках, нанокомпозитах та 2D-структурах, оптимізувати геометрію компонентів та властивості інтерфейсів, а також підбирати методи теплового менеджменту для підвищення стабільності та довговічності пристроїв.

Отже, розмірні ефекти виникають через зміну механізмів взаємодії фононів із середовищем, межами та поверхнею при зменшенні геометричних розмірів матеріалу. Це зумовлює потребу у використанні спеціальних моделей і методів моделювання теплопереносу, які враховують балістичні, хвильові та когерентні явища, а також вплив межових опор і шорсткості поверхні.

2.4. Класифікація методів моделювання теплопереносу на мікро- та нано-рівні

Моделювання процесів теплопереносу на мікро- та нано-рівнях є надзвичайно важливим інструментом для розуміння механізмів перенесення енергії в сучасних матеріалах і пристроях. У таких масштабах класичні підходи, які базуються на законі Фур'є, втрачають свою точність, оскільки вони передбачають безперервність середовища та дифузійний характер теплопереносу. В нанорозмірних структурах ці припущення перестають виконуватись через появу балістичних режимів, квантових ефектів та значного впливу границь і поверхонь.

У сучасній науковій практиці сформувались різні підходи до моделювання теплопереносу, які умовно поділяються на дві основні групи — континуальні (continuum) та атомістичні (atomistic) методи.

2.4.1. Континуальні методи (Continuum approaches)

Континуальні методи описують теплоперенос через середні макроскопічні величини, такі як температура, густина теплового потоку або ентропія, і не розглядають окремі атоми чи фонони. Основою цих методів є фононне рівняння Больцмана (Boltzmann Transport Equation, BTE), яке описує еволюцію розподілу фононів у просторі, часі та за напрямками руху. Розв'язання BTE дозволяє визначити теплопровідність матеріалу з урахуванням різних механізмів розсіювання — міжфононного, на дефектах, домішках або границях.

У залежності від умов, BTE може бути розв'язане у дифузійному наближенні, що приводить до класичного закону Фур'є, або у балістичному режимі, який враховує перенесення енергії без зіткнень. Сучасні реалізації цього підходу часто базуються на first-principles моделюванні, зокрема на

методі Density Functional Theory (DFT). Це дозволяє отримати параметри міжатомних взаємодій, частоти фононів, часи релаксації та визначити внесок окремих фононних мод у теплопровідність.

Континуальні методи зручні для опису теплопереносу у структурах великих розмірів або для систем, де переважає дифузійний режим. Проте вони втрачають точність при моделюванні наноструктур, де проявляються атомістичні та хвильові ефекти.

2.4.2. Атомістичні методи (Atomistic approaches)

Атомістичні методи розглядають теплоперенос на мікроскопічному рівні, описуючи рух і взаємодію окремих атомів, молекул та фононів. Вони дозволяють безпосередньо враховувати вплив структурних дефектів, границь, домішок, локальних коливань решітки та інших факторів, які важко змодельовувати у континуальних підходах.

До основних атомістичних методів належать:

Molecular Dynamics (MD) — метод молекулярної динаміки, що ґрунтується на чисельному інтегруванні рівнянь руху атомів відповідно до міжатомних потенціалів. Існують дві основні модифікації MD:

Equilibrium MD (EMD) — визначення теплопровідності за допомогою флуктуацій теплового потоку у стані рівноваги, використовуючи рівняння Гріна–Кубо;

Non-Equilibrium MD (NEMD) — створення штучного теплового градієнта для безпосереднього вимірювання теплового потоку.

Метод MD дозволяє враховувати реальні механізми фононного розсіювання, однак потребує значних обчислювальних ресурсів і обмежений розмірами моделюемого зразка.

Lattice Dynamics (LD) — метод, що базується на гармонічному та ангармонічному аналізі коливальних станів кристалічної решітки. Використовується для визначення фононних спектрів, густини станів і коефіцієнтів теплопровідності. Часто застосовується разом із DFT для розрахунку міжатомних параметрів.

Non-Equilibrium Green's Function (NEGF) — квантово-механічний підхід для моделювання теплопереносу у сильно нерівноважних або відкритих системах. Особливо ефективний для нанопровідників, квантових точок, гетероструктур і матеріалів зі складною геометрією. Метод дозволяє враховувати когерентні та інтерференційні ефекти, розглядаючи фонони як квантові частинки.

2.4.3. Порівняння та взаємозв'язок підходів

Континуальні та атомістичні методи доповнюють один одного. Атомістичні підходи забезпечують мікроскопічну інформацію про міжатомні взаємодії та властивості фононів, тоді як континуальні моделі дозволяють описати теплоперенос у більших масштабах з меншими обчислювальними затратами.

Дані, отримані за допомогою MD, LD або NEGF, часто використовуються для калібрування параметрів у континуальних моделях ВТЕ. Такий підхід дозволяє поєднати високу точність моделювання на мікро- та нано-рівнях із ефективністю для великих систем, що особливо важливо при проектуванні сучасних наноструктур і мікроелектронних компонентів.

2.5. Моделювання теплопереносу з перших принципів

First-principles моделювання, або моделювання «з перших принципів», ґрунтується на квантово-механічному описі взаємодій у матеріалі без використання емпіричних параметрів. На відміну від класичних методів, які часто застосовують апроксимовані коефіцієнти теплопровідності або підлаштовують параметри під експериментальні дані, first-principles підхід дозволяє одержати інформацію безпосередньо із фундаментальних фізичних законів, забезпечуючи максимально точне моделювання поведінки матеріалу.

Найпоширенішим методом для реалізації first-principles розрахунків є Density Functional Theory (DFT) — метод функціонала густини, який дозволяє визначати міжатомні сили, фононні спектри та характеристики розсіювання фононів без експериментальних припущень. DFT базується на принципі, що енергія електронної системи однозначно визначається електронною густиною, що дозволяє обчислювати потенціальні енергетичні поверхні та сили, які впливають на рух атомів у кристалічній решітці.

У контексті теплопереносу first-principles підхід дозволяє побудувати Boltzmann Transport Equation (BTE) на основі реальних фононних властивостей матеріалу. Це включає визначення частот фононів, групових швидкостей та часу релаксації, а також внеску окремих мод фононів у загальну теплопровідність. Завдяки цьому можна оцінювати не лише середню теплопровідність, а й внесок конкретних фононних режимів у перенесення теплової енергії. Такий підхід особливо корисний для систем, де експериментальне вимірювання є складним або обмеженим — наноматеріали, двовимірні кристали, складні композитні структури або матеріали з високим рівнем дефектності.

Однією з ключових переваг first-principles моделювання є відсутність необхідності підгонки параметрів під експеримент, що дозволяє прогнозувати властивості нових матеріалів, ще не синтезованих у лабораторії. Наприклад, можна оцінювати теплопровідність графену, бор-арсеніду (BAs), MoS_2 та інших 2D матеріалів з урахуванням реальної структури їх кристалічної решітки і міжатомних взаємодій. Це робить метод надзвичайно ефективним для дослідження матеріалів для мікро- і наноелектроніки, термоелектричних пристроїв, нанокомпозитів і теплоізоляційних систем.

First-principles моделювання також дозволяє враховувати квантові та хвильові ефекти фононів, що стають критично важливими на наномасштабі. У класичних макромасштабних матеріалах теплопровідність можна описати за допомогою закону Фур'є, який базується на дифузійному перенесенні енергії. Проте в наноструктурах, де розміри об'єкта порівнянні з довжиною вільного пробігу фононів, проявляються балістичні та когерентні режими теплопереносу. First-principles підхід дозволяє передбачити внесок таких ефектів у загальний тепловий потік і розрахувати, як межі, дефекти та домішки змінюють теплопровідність.

Для реалізації BTE з використанням first-principles даних обчислюються міжатомні сили (interatomic force constants, IFC), які визначають динаміку коливань кристалічної решітки. На їх основі можна отримати фононні спектри, густину станів, групові швидкості і часи релаксації. Використовуючи ці параметри, розв'язують BTE як у дифузійному наближенні (для опису класичного теплопереносу), так і в балістичному режимі, що дозволяє моделювати тепловий потік без внутрішніх зіткнень. Таким чином, first-principles підхід забезпечує повний фізичний опис теплопереносу, враховуючи всі основні механізми розсіювання фононів: міжфононне, на дефектах, домішках та межах.

Комбінування first-principles методів з іншими чисельними підходами, такими як Molecular Dynamics (MD), Lattice Dynamics (LD) або Non-Equilibrium Green's Function (NEGF), дозволяє отримати більш детальну та точну картину теплопереносу. MD дозволяє відстежувати рух атомів у реальному часі, NEGF — враховувати квантові ефекти в нерівноважних системах, а LD дає спектральний аналіз фононних мод. Дані, отримані з цих методів, можуть бути використані для калібрування BTE, що забезпечує поєднання точності та ефективності.

First-principles моделювання активно застосовується для:

прогнозування теплопровідності нових матеріалів та композитів;

аналізу теплопереносу в нанопровідниках, тонких плівках і 2D матеріалах;

оцінки впливу дефектів, домішок, граней і інтерфейсів на тепловий потік;

моделювання термоелектричних ефектів і процесів у мікро- та наноелектронних пристроях;

вивчення когерентних та балистичних режимів теплопереносу на наномасштабі.

Сучасні дослідження показують, що саме first-principles підхід дозволяє зрозуміти фундаментальні механізми теплопереносу, які неможливо спостерігати експериментально через технічні обмеження. Наприклад, можна оцінити, як окремі моди фононів сприяють або гальмують передачу тепла, передбачити ефект ізоляції через межі або дефекти, а також зрозуміти роль когерентних хвильових процесів у низькорозмірних системах.

Таким чином, first-principles моделювання теплопереносу є ключовим інструментом у сучасній науковій практиці. Воно дозволяє:

Враховувати фундаментальні квантові та хвильові ефекти;

Розглядати внесок окремих фононних мод у теплопровідність;

Моделювати поведінку матеріалів на мікро- і нано-рівнях без емпіричних припущень;

Оцінювати вплив геометрії, дефектів і межових ефектів;

Прогнозувати властивості нових матеріалів і структур, ще не синтезованих у лабораторії;

Поєднувати точність з ефективністю при моделюванні складних систем.

Завдяки цьому підходу можна підвищити точність прогнозування теплових режимів у сучасних елементах мікро- та наноелектроніки, термоелектричних матеріалах, нанокompозитах і 2D матеріалах, що робить first-principles моделювання невід'ємним інструментом для дослідження сучасних наноматеріалів і проектування нових високоефективних систем теплопереносу.

2.6. Висновок до розділу

У межах даного розділу було окреслено фундаментальні підходи до аналізу теплопереносу на мікро- та наномасштабах і підкреслено, що класичні макроскопічні моделі не можуть адекватно описувати теплові процеси в умовах, коли довжина вільного пробігу фононів стає порівняною з геометричними параметрами структури. Показано, що саме на цих масштабах виникають нові фізичні режими — балистичний та

напівбалістичний перенос, істотно зростає роль поверхневих ефектів, міжфазного опору та геометричних обмежень, що вимагає переходу від традиційних дифузійних моделей до кінетичних і квантово-механічних описів. Акцентовано також, що експериментальні методи дослідження теплопереносу у таких системах, хоча й залишаються цінними, мають низку обмежень, пов'язаних з просторовою роздільністю, тепловими флуктуаціями та складністю інтерпретації вимірювань на наноуровні. Це зумовлює зростаючу роль чисельних симуляцій, які дозволяють отримати інформацію, недоступну прямому спостереженню, та формують основу для прогнозування поведінки матеріалів у реальних пристроях.

Сучасні моделі теплопереносу, засновані на Boltzmann Transport Equation, Molecular Dynamics, Non-Equilibrium Green's Functions та інших методах, демонструють здатність відтворювати складні фізичні механізми розсіювання, межові ефекти та спектральний внесок окремих фононних мод. Важливим результатом аналізу є усвідомлення того, що в наноструктурах навіть незначна зміна ширини, товщини чи рельєфу поверхні може кардинально вплинути на тепловий потік, а експериментальна невизначеність таких параметрів стає визначальним фактором точності вимірювань. Включення реальної геометрії, шорсткості поверхонь і межових умов у моделі підвищує достовірність чисельних результатів та забезпечує узгодження з експериментом.

Проведений огляд підкреслює, що подальше удосконалення моделей теплопереносу на наномасштабі має не лише фундаментальне значення, але й прямий прикладний потенціал, адже сучасні технології — від мікроелектроніки до термоелектрики та нанокомпозитів — критично залежать від ефективного теплового менеджменту. Саме тому розвиток методів моделювання, здатних відтворювати реальні фізичні умови в наноструктурах, стає ключем до створення нових матеріалів та оптимізації існуючих технологічних рішень. Таким чином, висвітлений у цьому розділі підхід формує підґрунтя для подальших досліджень і дозволяє перейти від якісного розуміння до точного кількісного опису теплопереносу в системах, що функціонують у мікро- та нано-масштабному режимі.

РОЗДІЛ 3. ПОТОКИ ТЕПЛА ФОНОНІВ В СТРУКТУРАХ З ПРЯМОКУТНИМ ПЕРЕРІЗОМ

3.1. Вступ до розділу

У цьому розділі розглядаються теплові потоки, які переносяться фононами при низьких температурах, коли взаємодія фононів між собою є незначною і може бути знехтувана. У таких умовах фонони рухаються практично незалежно, і основним механізмом переносу тепла стає взаємодія фононів з межами матеріалу та дефектами кристалічної решітки. Теплові потоки в цьому режимі визначаються переважно характеристиками джерел і поглиначів тепла, а також властивостями поверхонь і межових шарів, що формують структуру провідника. Важливо зазначити, що при зменшенні геометричних розмірів елементів матеріалу до мікро- та наномасштабів проявляються балістичні ефекти, коли довжина вільного пробігу фононів стає порівнянною з розміром об'єкта, що призводить до зміни розподілу теплового потоку в просторі та часу.

Для побудови моделі теплопереносу у цьому дослідженні розглядаються стержневі структури з різними формами поперечного перерізу, що дозволяє врахувати вплив геометрії на тепловий потік та розподіл енергії фононів уздовж довжини зразка. Вибір різних перерізів, включаючи прямокутні, круглі та довгі плоскі двовимірні стрічки, забезпечує комплексний підхід до аналізу і дозволяє сформулювати загальні рівняння для різних типів наноструктур. Такий підхід є важливим, оскільки геометричні обмеження та форма поперечного перерізу значною мірою визначають частоту зіткнень фононів з межами, їх траєкторії та можливість прояву когерентних хвильових ефектів у тонких структурах. Особливо в нанопровідниках та тонких плівках хвильові властивості фононів і характер їхнього розсіювання на межах істотно змінюють локальний розподіл температури, створюючи неоднорідні профілі теплового потоку, що не описуються класичними дифузійними моделями.

Для опису цього явища ми пропонуємо інтегральні рівняння, які визначають функції розподілу фононів, що падають на межі зразка та відбиваються від них. Ці рівняння враховують різні механізми віддзеркалення фононів — від дзеркального (спекулярного) до повністю дифузного, що дозволяє більш точно моделювати реальні умови переносу тепла у наноструктурах. Таке формулювання є логічним узагальненням класичних підходів до балістичного переносу частинок у циліндричних

трубах скінченної довжини при умовах повної акумуляції на стінках [1, 3], а також розширює відомі рівняння для фононів у циліндричних стержнях [4, 5, 9] на випадки структур з довільним поперечним перерізом і двовимірних систем. Це дозволяє врахувати складні ефекти реальної геометрії, включаючи асиметричний переріз, неоднорідності товщини і локальні варіації властивостей поверхні, що є критично важливим для точного опису балістичного та напівбалістичного теплопереносу.

Особливу увагу приділено впливу довжини зразка на поведінку теплового потоку. У коротких стержнях і тонких плівках середня довжина вільного пробігу фононів наближається до розміру зразка, і тепловий потік перестає бути лінійним уздовж довжини провідника. Це призводить до появи складних профілів температури, які демонструють відхилення від прогнозів класичних моделей і можуть включати локальні максимуми та мінімуми теплового потоку. Такі ефекти є особливо значущими для наноструктур, де співвідношення довжини вільного пробігу до розміру зразка може досягати одиниць або більше.

Крім того, врахування різних механізмів віддзеркалення фононів на межах дозволяє змодельовати вплив реальної шорсткості поверхні, присутності дефектів і неоднорідностей матеріалу на формування теплового потоку. Спекулярне віддзеркалення описує випадки, коли фонон зберігає напрямок руху після зіткнення з межею, тоді як дифузне віддзеркалення відповідає повністю хаотичному розсіюванню енергії. Комбінація цих ефектів формує складну фізичну картину теплопереносу, що відповідає експериментально спостережуваним явищам у нанопровідниках, тонких плівках та двовимірних стрічках.

Таким чином, запропонований підхід дозволяє систематично вивчати формування теплових потоків у наноструктурах різної геометрії, враховуючи ключові фізичні механізми — балістичний та напівбалістичний перенос, хвильові ефекти фононів, неоднорідності поверхні і межові взаємодії. Він забезпечує можливість побудови більш точних прогнозів теплового режиму матеріалів і пристроїв, що є критично важливим для розвитку сучасної мікро- та наноелектроніки, високоефективних термоелектричних систем, нанокомпозитів і технологій управління тепловими потоками на наномасштабі. Такий підхід формує фундамент для подальшого розвитку фізично обґрунтованих моделей теплопереносу в тонких провідниках і двовимірних структурах, що працюють у реальних умовах експлуатації, забезпечуючи високу точність та узгодженість із експериментальними даними.

3.2. Інтегральні рівняння для функції розподілу балістичних фононів

Ключове рівняння в запропонованій моделі описує функцію розподілу фононів, що потрапляють на межу в точці, визначеній її радіусно-векторним $\mathbf{r}_1$:

$$f_{inc}(r_1, k_{inc}) = \int_{S_{source}} F(r_2, r_1) dr_2 + \int_{S_{edge}} dr_2 f_{ref}(r_2, k_{ref}) F(r_2, r_1) \quad (1)$$

Тут вектор $\mathbf{k}_{ref}$ є одиничним вектором у напрямку імпульсу відбитого фонона, і $\mathbf{k}_{inc}$ є одиничним вектором імпульсу падаючого фонона.

Для класичних частинок потік визначається тиском і температурою джерела за допомогою розподілу Максвелла, тоді як для теплових фононних систем він залежить від температури зразка і описується законом Планка про випромінювання чорного тіла.

Перший член рівняння (1) описує потік частинок, що надходить у задану точку на бічній поверхні з радіусом-вектором $\mathbf{r}_1$ від усієї площі S_{source} джерела. Вектор r_2 представляє положення (радіус-вектор) точки на джерелі, яка випромінює фонон з імпульсом k_{inc} , а вектор r_1 відноситься до положення точки на бічній поверхні, де цей фонон приймається. Функція $F(r_1, r_2)$ характеризує потік частинок між двома нескінченно малими елементами поверхні, які можуть випромінювати, поглинати або відбивати, і визначається добре відомим співвідношенням [11].

$$F(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi} \frac{(n_1(r_1 - r_2))(n_2(r_2 - r_1))}{r_{12}^4} = \frac{1}{\pi} \frac{\cos\theta_1 \cos\theta_2}{r_{12}^2}. \quad (2)$$

Тут $\mathbf{n}_1$ і $\mathbf{n}_2$ — одиничні нормальні вектори до відповідних елементів поверхні, а $r_1 - r_2$ — вектор, що з'єднує один елемент поверхні з іншим. Коефіцієнт π забезпечує нормалізацію. Це співвідношення описує ізотропний кутовий розподіл випромінюваних частинок (закон Ламберта), а для відбитих частинок воно відповідає повній адаптації [12].

Рівняння (1) також може описувати розподіл фононів у двовимірних нанопровідниках (нанострічках) [6]. У цьому випадку функція $F(r_1, r_2)$ описує кількість фононів, що переходять від одного лінійного елемента межі до іншого лінійного елемента межі.

$$F_{2D} = \frac{(n_1 r_{12})(n_2 r_{21})}{r_{12}^4} = \frac{\cos\phi_1 \cos\phi_2}{r_{12}^2}. \quad (3)$$

Другий член рівняння (1) описує потік частинок, що надходить у задану точку на бічній поверхні від елементів поверхні, розташованих в інших точках бічної поверхні. Функція Φ_{ref} описує кутовий і просторовий розподіл фононів, що випромінюються з цієї області поверхні. Інтеграл по S_{edge} ібереться по всій бічній поверхні провідника.

Взаємозв'язок між функціями розподілу падаючих і відбитих (або випромінюваних) фононів описується законом відбиття для даної поверхні, який в цій моделі розглядається як поєднання дзеркального і дифузного відбиття.

У найпростішій моделі залежність функції розподілу від імпульсу відбитих фононів у кожній точці межі може бути записана як:

$$f_{ref}(r_1, k) = pf_{inc}(r_1, k_{inc}) + (1 - p) \int f_{inc}(r_1, k_{inc}) \frac{dk_{inc}}{2\pi} \quad (4)$$

Тут коефіцієнт p є так званим параметром дзеркальності поверхні. Він дорівнює одиниці для чисто дзеркального відбиття і нулю для протилежного випадку повністю дифузного відбиття.

У випадку дзеркального відбиття вектори падаючого і відбитого світла, $\mathbf{k}$ вектори пов'язані класичним законом відбиття (Снелла-Френеля) – кут падіння дорівнює куту відбиття відносно нормалі до поверхні або збереженню тангенціальної складової імпульсу фонона:

$$k = k_{inc} + 2n(nk_{inc}). \quad (5)$$

де $\mathbf{n}$ — одиничний нормальний вектор на поверхні.

Замість використання спрощеної моделі (4) можна застосувати альтернативну формулу функції розподілу для відбитих фононів:

$$f_{ref}(r, k) = \int G(k, k_{inc}) f_{inc}(r, k_{inc}) \frac{dk_{inc}}{2\pi} \quad (6)$$

Інтегральне ядро G характеризує залежність напрямку відбитого фонона від напрямку падаючого фонона. Для дзеркального відбиття, G зводиться до дельта-функції, що відповідає закону дзеркального відбиття:

$$G_{Spec} = 2\pi\delta(k_{inc} + 2n(nk_{inc}) - k) \quad (7)$$

У випадку часткового або повністю дифузного відбиття ядро можна апроксимувати гаусовим розподілом,

$$G_{Diff} = N \exp \left(- \frac{(k_{inc} + 2n(nk_{inc}) - k)^2}{2\Omega_D^2} \right) \quad (8)$$

Тут параметр ширини Ω_D контролює ступінь дифузії. Межа $\Omega_D \rightarrow 0$ відноситься до випадку дзеркального відбиття (дельта-функція), а межа $\Omega_D \rightarrow \infty$ відноситься до випадку повністю дифузного відбиття з ізотропним кутовим розподілом випромінюваних фононів.

Крім того, можна розглянути комбінацію дельта-подібного піку та гауссового розподілу, що розширює просту модель (4) до випадку більш складних поверхонь:

$$G = pG_{Spec} + (1 - p)G_{Diff} \quad (9)$$

де p контролює баланс між дзеркальним і дифузним відбиттям, а значення Ω_D в цьому випадку визначається властивостями поверхні (наприклад, шорсткістю) і, в загальному випадку, залежить від довжини хвилі фонону і кута падіння [7].

Формально, отримана система двох рівнянь (1) і (4) для двох невідомих функцій вирішує задачу розподілу фононів як функції поздовжньої координати вздовж провідника. У випадку дифузного розсіювання ця система зводиться до інтегрального рівняння для функції розподілу відбитих фононів. Це рівняння було вперше введено Клаузингом [3] у контексті потоку розрідженого газу через циліндричну трубу скінченної довжини.

При вивченні теплових потоків квазічастинок для плоских зразків, таких як нанострічки або наноплівки, відповідні рівняння були отримані в [6 і 15] і вирішені для чисто дифузійного обмеження [6] і проміжного випадку між дзеркальним і дифузійним обмеженнями [15].

У випадку циліндричних провідників це рівняння було спеціально розглянуто в дослідженні, де було проведено порівняння між чисельним методом і запропонованим аналітичним наближеним рішенням у дифузійному режимі [9], а режим розсіювання типу суміші буде обговорено в цій статті.

Аналітичне рішення для 3D провідників з круглим і прямокутним поперечним перерізом будь-яких розмірів буде отримано і обговорено в представлений статті.

3.3. Інтегральні рівняння та їх чисельне розв'язання в дифузійному режимі

Новаторські результати Кнудсена [3], який запропонував ідею опису потоків частинок у балістичному режимі, були узагальнені Клаузингом [1], який розглядав проблему транспортування розрідженого газу по трубах скінченної довжини. Він вивів інтегральне рівняння, яке можна отримати з рівнянь (1) і (4) у дифузійному режимі і записати у наступній узагальненій формі:

$$\Phi(x) = g(x) + \int_0^L h(x_1 - x) \Phi(x_1) dx_1, \quad (10)$$

де L — довжина провідника, що з'єднує джерело і сток частинок. Перший член у рівнянні (10) визначає потік частинок, що надходить до заданої точки на бічній поверхні поперечного перерізу з координатою x з усієї площі джерела S_{source} . Другий член описує частинки, що падають у заданій точці на бічній поверхні з поздовжньою координатою x від точок поверхневого елемента, розташованого на периметрі поперечного перерізу провідника, який знаходиться в точці з координатою x_1 .

Значення $\Phi(x)$ є нормалізованим параметром, що визначає щільність потоку частинок у заданій точці межі провідника з поздовжньою координатою x .

$$\Phi(x) = \frac{\Psi(x) - \Psi_{cooler}}{\Psi_{heater} - \Psi_{cooler}} \quad (11)$$

Тут нас цікавить щільність фононного потоку. Таким чином, значення

$$\Psi_{heater} = \frac{1}{S_h} \int_{S_h} d^2\rho \int_{k n_h > 0} V n_h \varepsilon(k) f(T_h, k) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (12 a)$$

визначає тепловий потік, випромінюваний нагрівачем з температурою T_h та

$$\Psi_{cooler} = \frac{1}{S_c} \int_{S_c} d^2\rho \int_{k n_c > 0} V n_c \varepsilon(k) f(T_c, k) \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \quad (12 b)$$

визначає тепловий потік, випромінюваний охолоджувачем з температурою T_c . Значення $S_c = S_h$ є площею поперечного перерізу, V є груповою швидкістю фононів, n_h і n_c є нормальними векторами до поверхонь нагрівача і

Рисунок 1. Схематичне зображення фононів, випромінюваних джерелом тепла, відбитих від стінки в точці x_1 , і взаємодіючих зі стінкою в точці x .

Для плоских 2D структур, таких як нанострічки або наноплівки, рівняння (10) спрощується до відповідного рівняння, наведеного в [6]:

$$\Phi(X) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{X}{\sqrt{1+X^2}} \right] + \frac{1}{2} \int_0^{\frac{L}{W}} dX_1 \frac{1}{\left[1 + (X-X_1)^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \Phi(X_1). \quad (14)$$

Тут координата x нормалізована до ширини W двовимірного провідника $X = x / W$. На рисунку 2 показано геометрію, що розглядається для плоских 2D провідників. Система моделюється як смуга скінченної довжини і ширини з адіабатичними бічними сторонами. Різниця температур між кінцями зумовлює рух фононів уздовж провідника.

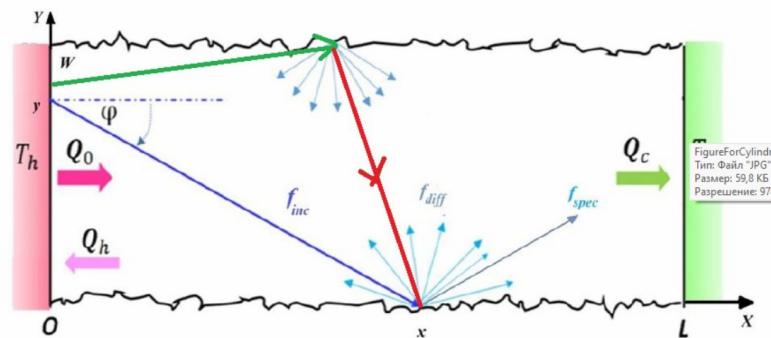


Рисунок 2. Геометрія задачі у двовимірному випадку. Схематичне зображення фононів, випромінюваних джерелом тепла, відбитих від стінки в точці x_1 , і потім взаємодіючих зі стінкою в точці x .

Щоб застосувати єдиний аналітичний метод до всіх форм, ми змінюємо нормалізацію поздовжньої координати x з нормалізації відносно поперечного розміру (діаметра або ширини, тобто $X = x / D$ or $X = x / W$) на нормалізацію відносно поздовжнього розміру $x \rightarrow \frac{x}{L}$, тобто довжини зразка/структури L . Формально ми розглядаємо структури одиничної довжини, але з різними діаметрами або ширинами. У поздовжніх змінних, нормалізованих до довжини структури, інтегральне рівняння (10) набуває вигляду

$$\Phi(x) = g(x) + \int_0^1 h(x_1 - x) \Phi(x_1) dx_1, \quad (15)$$

де неоднорідність має вигляд

$$g_{Cyl}(x) = \frac{1}{d} \left\{ \frac{x^2 + \frac{d^2}{2}}{\sqrt{x^2 + d^2}} - x \right\}, \quad (16)$$

де $d = D / L$, а ядро

$$h_{Cyl}(x) = \frac{1}{d} \left\{ 1 - |x| \frac{x^2 + 3\frac{d^2}{2}}{(x^2 + d^2)^{\frac{3}{2}}} \right\}. \quad (17)$$

Тут ми також нагадаємо формули для 2-вимірного випадку [6]

$$g_{2D}(x) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{x}{\sqrt{w^2 + x^2}} \right] \quad (18)$$

а для ядра рівняння (7)

$$h_{2D}(x) = \frac{w^2}{2[w^2 + x^2]^{\frac{3}{2}}} \quad (19)$$

Рівняння, аналогічне рівнянням (10) і (15), також можна отримати для стрижневих конструкцій з прямокутним поперечним перерізом для довільних співвідношень між довжиною L , шириною a , і висотою b . Геометрія стрижнів з прямокутним поперечним перерізом представлена на рис. 3. Стрижень моделюється як призматичний стрижень з ізольованими бічними гранями. Різниця температур між торцевими поверхнями викликає теплопередачу за допомогою фононів уздовж його довжини.

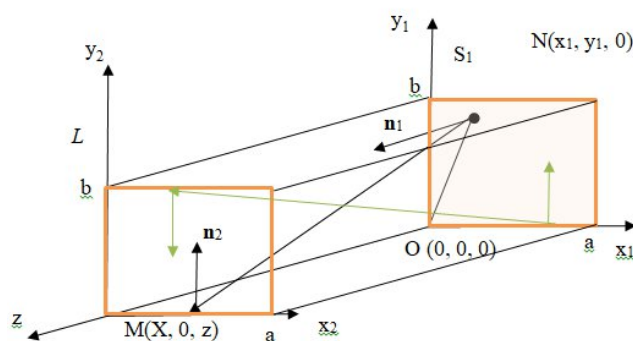


Рисунок 3. Геометрія задачі у випадку прямокутного поперечного перерізу.

У цьому випадку явне вираження для функції $g(x)$ має вигляд

$$g_{rect}(x) = \frac{G(x,a,b)+G(x,b,a)}{a+b}, \quad (20)$$

де

$$G(x,a,b) = \frac{x}{\pi} \left\{ \frac{a}{x} \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{x} \right) - \frac{a}{\sqrt{x^2+b^2}} \operatorname{arctg} \left(\frac{a}{\sqrt{x^2+b^2}} \right) - \ln \sqrt{\frac{(a^2+x^2)(b^2+x^2)}{x^2(a^2+b^2+x^2)}} \right\}. \quad (21)$$

Ядро інтегрального рівняння у прямокутному випадку можна записати наступним чином:

$$h(a,b,x) = h_1(a,b,x) + h_1(b,a,x) \quad (22)$$

3

$$h_1(x,a,b) = \frac{1}{\pi(a+b)} \left\{ \frac{b^2}{(b^2+x^2)} \frac{a}{\sqrt{b^2+x^2}} \operatorname{arctg} \frac{a}{\sqrt{b^2+x^2}} + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{a^2+x^2}{x^2} \frac{b^2+x^2}{a^2+b^2+x^2} \right) \right\} \quad (23)$$

Як і у випадку циліндричних та 2D-структур, зручно нормалізувати розміри та координати за довжиною (тобто формально розглядати структуру одиничної довжини), тим самим зводячи задачу до форми рівняння (15).

Розв'язки інтегрального рівняння (15) виявляють характерну особливість: нормалізований потік енергії випромінювання $\Phi(x)$ має майже лінійну залежність від просторової координати [3 – 6, 9]. Нахил цієї температурної залежності залежить від співвідношення довжини та поперечного розміру зразка. Як приклад, на рис. 4 наведено результати для циліндричного випадку, а на рис. 5 – для квадратного та прямокутного перерізів. Крім того, на рисунках показано незначне відхилення фактичного рішення від лінійної інтерполяції, що з'єднує значення на кінцях зразка.

Отже, чисельне рішення [3, 6, 9, 10] запропонованої системи рівнянь полегшує отримання наближеного аналітичного рішення задачі. Такий підхід був запропонований в [6] для 2D наноструктур і використаний для циліндричних стрижнів в [9] для випадку повністю дифузійного відбиття. Важлива особливість, що випливає з чисельного рішення для енергетичного потоку фононів, що вражають межі стін у заданому місці, вказує на те, що він є практично лінійною функцією координати x . Ця функція є квазігоризонтальною для коротких широких зразків і має максимальний (майже одиничний) нахил для довгих вузьких зразків. Така поведінка дозволяє нам розглянути лінійну залежність для наближеного рішення для

функцій розподілу в рівняннях (1) і (3) і отримати явні рівняння для розподілу температури і для загального теплового потоку вздовж зразка.

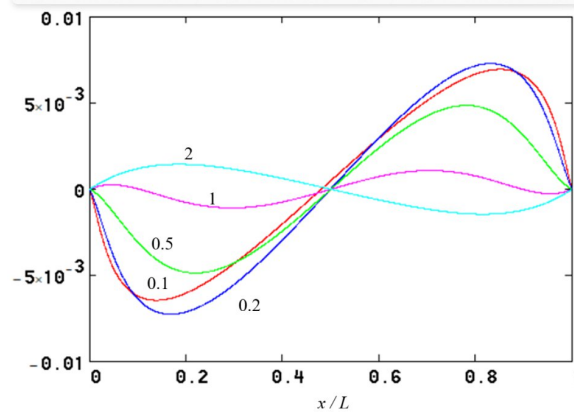


Рисунок 4. Приклад майже лінійної залежності (а) для циліндричного корпусу та відхилення (б) реального рішення від лінійної інтерполяції для циліндричних стрижнів з різними співвідношеннями D/L .

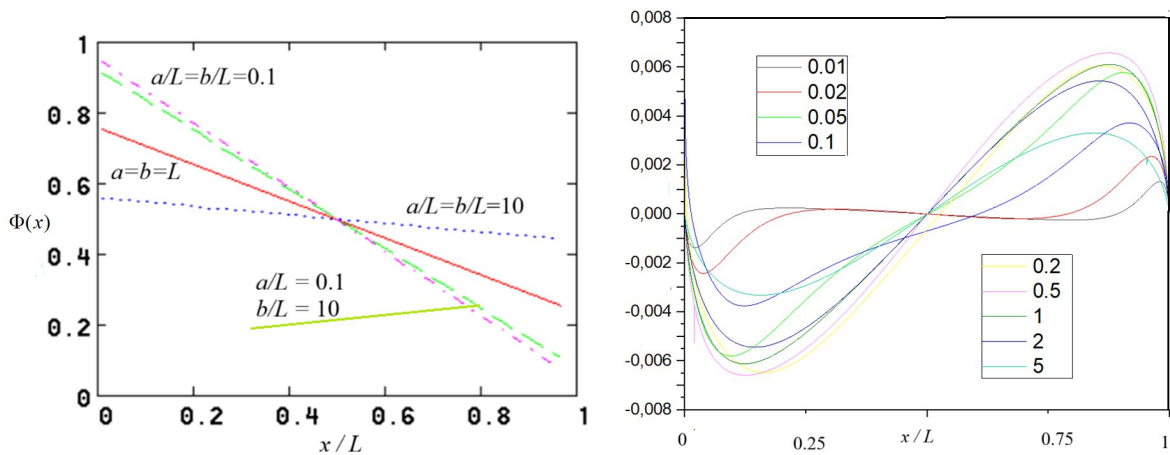


Рисунок 5. Приклад майже лінійної залежності (а) та відхилення (б) реального рішення від лінійної інтерполяції для прямокутного поперечного перерізу для різних значень ширини a та висоти b .

3.5. Наближене аналітичне рішення для будь-якого поперечного перерізу та розмірів

Квазілінійна поведінка енергетичного потоку $\Phi(x)$ з x дозволяє розглянути наступне лінійне наближення для аналітичного опису залежності значення $\Phi_l(x)$ від координати:

$$\Phi_l(x) = \frac{1}{2} + \Delta\Phi \cdot \left[\frac{1}{2} - x \right], \quad (24)$$

з коефіцієнтом $\Delta\Phi$ який виявляється функцією розмірів зразка і дорівнює різниці значень теплового потоку на кінцях зразка:

$$\Phi_I(0) - \Phi_I(1) = \Delta\Phi. \quad (25)$$

Це наближення було вперше запропоновано Клаузингом [3] для дослідження розріджених газів у трубах, і ми використовували його для дослідження теплових потоків у двовимірних наноструктурах [16] та циліндричних стрижнях [9].

Таким чином, якщо ми шукаємо рішення рівняння (15) у вигляді рівняння (24), задача зводиться до знаходження різниці $\Delta\Phi$ енергетичного потоку на кінцях зразка. У роботі Клаузіуса [3] обговорювалися різні пропозиції щодо вибору цього значення, наприклад, мінімізація відхилення чисельного рішення від аналітичного по всій довжині зразка. У роботі [16] було запропоновано знайти коефіцієнт $\Delta\Phi$ таким чином, щоб функція, визначена рівнянням (24), точно відповідала розв'язку інтегрального рівняння (15) на кінцях зразка, тобто

$$\Phi(x=0) = g(x=0) + \int_0^1 h(x_1)\Phi(x_1)dx_1 \quad (26)$$

та

$$\Phi(x=1) = g(x=1) + \int_0^1 h(x_1-1)\Phi(x_1)dx_1. \quad (27)$$

Завдяки симетрії рішення $\Phi(x) = 1 - \Phi(1-x)$ відносно середини провідника, ці дві умови не суперечать одна одній і є достатніми для визначення коефіцієнта $\Delta\Phi$.

Щоб вирішити це рівняння за допомогою запропонованого аналітичного підходу [16], зауважимо, що функція $h(x)$ є досить простою і може бути представлена явно за допомогою її первісної:

$$h(x)dx = dH(x) \quad (28)$$

Значення інтегральної константи, очевидно, не впливає на кінцевий результат, тому ми встановимо його рівним нулю. Більше того, такий вибір дозволяє відзначити корисне значення функції $H(0) = 0$.

Тепер, підставивши функцію $H(x)$ у рівняння (15), отримаємо:

$$\Phi(x) = g(x) + \int_0^1 \Phi(x_1)dH(x_1-x). \quad (29)$$

Інтегруючи частинами, отримуємо:

$$\Phi(x) = g(x) + \Phi(x_1)H(x_1 - x) \Big|_{x_1=0}^{x_1=1} - \int_0^1 H(x_1 - x) d\Phi(x_1)$$

і нарешті:

$$\Phi(x) = g(x) + \Phi(1)H(1 - x) - \Phi(0)H(-x) - \int_0^1 H(x_1 - x) \Phi'(x_1) dx_1. \quad (30)$$

Цей вираз все ще є точним рівнянням, еквівалентним рівнянню (15), для невідомої функції $\Phi(x)$.

Підставляємо наближене аналітичне рішення рівняння (24) в це рівняння і отримуємо:

$$\Phi_l(x) = g(x) + \Phi_l(1)H(1 - x) - \Phi_l(0)H(-x) + \Delta\Phi \int_0^1 H(x_1 - x) dx_1. \quad (31)$$

Тепер функцію $\Delta\Phi$ можна знайти безпосередньо з наведеного вище рівняння (31) у точках $x = 0$ і $x = 1$.

Нарешті, ми отримуємо

$$\Delta\Phi = \frac{g(0) - g(1)}{1 + H(1) - 2 \int_0^1 H(x) dx} \quad (32)$$

Це бажане загальне рішення для 3D-конструкцій будь-якого перерізу, а також для 2D-конструкцій.

Тепер ми можемо застосувати вираз (32) до конкретних випадків поперечної геометрії, використовуючи функції g та h введені вище для відповідних конфігурацій.

Спочатку нагадаємо, що в роботі [16] для двовимірного випадку було отримано наступний простий аналітичний вираз для різниці енергетичного потоку $\Delta\Phi(L, W)$ на кінцях нанострічки:

$$\Delta\Phi(L, W) = \left(1 + \frac{4W}{L} \frac{\sqrt{L^2 + W^2}}{L + W + \sqrt{L^2 + W^2}} \right)^{-1}, \quad (32)$$

де W — ширина двовимірного провідника.

У випадку циліндричного зразка стрижня з рівнянь (9) і (10) для цієї різниці отримуємо дещо більш громіздке вираження

$$\Delta\Phi(L, D) = \left(1 + 2D \frac{\sqrt{D^2 + L^2} \{ (D + 2L) \sqrt{D^2 + L^2} + (D^2 + 2L^2) \}}{L(4D^2 + LD + 4L^2) (L + \sqrt{D^2 + L^2})} \right)^{-1} \quad (33)$$

Незважаючи на свою громіздкість, вона є дійсною з певним ступенем точності для довільних співвідношень довжини циліндричного провідника до його діаметра і узагальнює інші наближення, зроблені для коефіцієнтів $\Delta\Phi(L,D)$ іншими авторами, починаючи з робіт Клаузіуса [1].

Як показано в посиланнях [6, 9], аналітичний вираз для різниці $\Delta\Phi$ чудово узгоджується з чисельними результатами як для циліндричних стрижневих структур, так і для нанострічок. Типовий приклад наведено на рис. 6, де показано залежність різниці від співвідношення діаметра до довжини, а також результати чисельних розрахунків і аналітичного рішення.

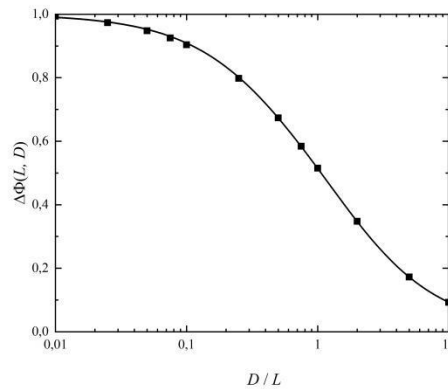


Рисунок 6. Амплітуда профілю енергетичного потоку $\Delta\Phi(L,D)$ для провідників циліндричного типу з різним співвідношенням діаметра до довжини. Точки представляють чисельне рішення інтегральних рівнянь (1), (4), а лінія відповідає аналітичному розрахунку за рівнянням (33).

У випадку прямокутного поперечного перерізу явне вираження для $\Delta\Phi$ є досить громіздким, тому ми запишемо його за допомогою функції grect (20):

$$\Delta\Phi_{rect} = \frac{g_{rect}(0) - g_{rect}(1)}{D_{rect}} \quad (34)$$

Тут чисельник у явній формі задається таким чином:

$$D_{rect} = \frac{1}{2} + \frac{ab}{L(a+b)} + \frac{a \cdot \arctg\left(\frac{a}{L}\right) + b \cdot \arctg\left(\frac{b}{L}\right)}{\pi(a+b)} - \frac{ab}{\pi(a+b)L} \left\{ \frac{b}{\sqrt{L^2+b^2}} \arctg\left(\frac{a}{\sqrt{L^2+b^2}}\right) + \frac{a}{\sqrt{L^2+a^2}} \arctg\left(\frac{b}{\sqrt{L^2+a^2}}\right) \right\} \quad (35)$$

Як один з результатів для провідників з прямокутним поперечним перерізом, на рис. 7 представлено залежність різниці потоків $\Delta\Phi(a,b,L)$ від співвідношення ширини до

довжини a/L для різних значень висоти b . Хороша збіжність дає змогу використовувати лінійну апроксимацію для подальшого аналізу теплових потоків.

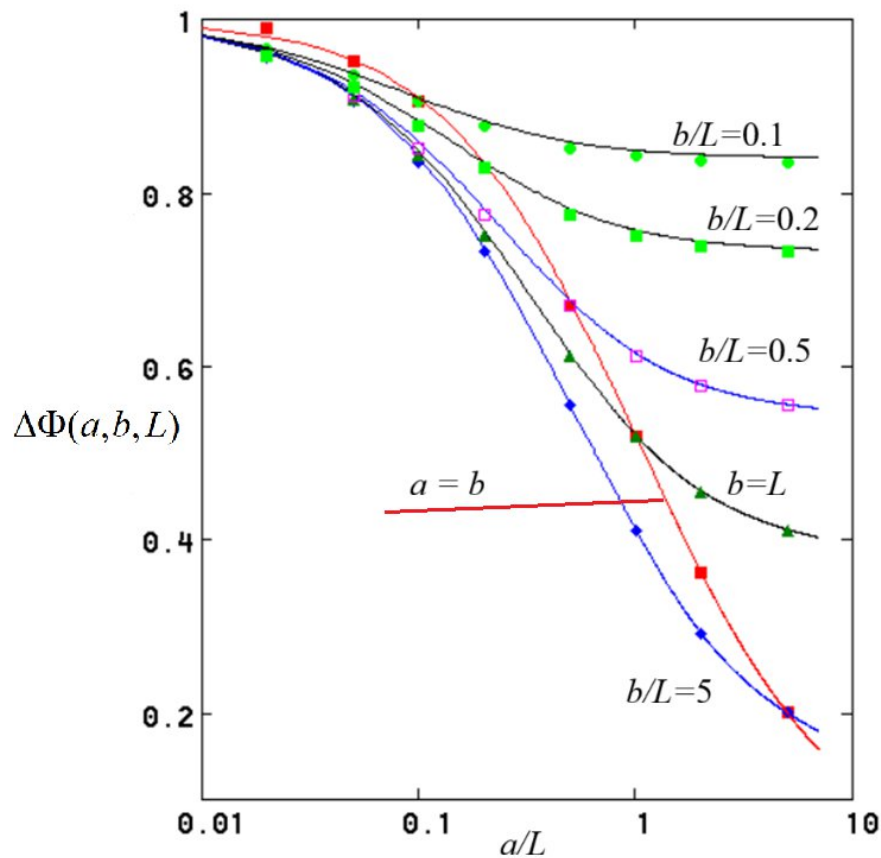


Рис. 7. Амплітуда профілю енергетичного потоку $\Delta\Phi(a, b, L)$ для прямокутних конструкцій з різним співвідношенням розміру до довжини a/L для різних значень b . Точки представляють чисельне рішення інтегральних рівнянь (1), (4), а лінія відповідає аналітичному розрахунку за рівнянням (34).

У всіх випадках отримані результати мають досить прозору фізичну інтерпретацію. Для дуже коротких провідників різниця температур наближається до нуля, а градієнт величини Φ є дуже малим, оскільки більшість фононів рухаються балістично від нагрівача до охолоджувача, не взаємодіючи з бічними стінками, тобто не сприяючи утворенню потоку фононів, що відбиваються від стінок.

Зі збільшенням довжини провідника різниця температур наближається до одиниці. Таку поведінку можна пояснити зменшенням ролі областей поблизу нагрівача та охолоджувача, де доступний фазовий простір для падаючих фононів є меншим порівняно з областями, розташованими далеко від кінців провідника.

Крім того, наявність такої неперервності Φ на кінцях зразка, як буде показано в наступних розділах, забезпечує додатковий внесок у загальний тепловий потік, що призводить до нових результатів щодо теплопровідності таких систем.

3.6. Теплові потоки за наявності прикладеної різниці температур

Тепер перейдемо до аналізу теплових потоків в іншій експериментальній конфігурації, де на провідник накладається різниця температур: нагрівач з температурою

T_h розташований в точці $x = 0$, а холодний резервуар (відвід) з температурою T_c розміщений в точці $x = L$. Бічні стінки зразка вважаються адіабатичними.

За відсутності бічних стінок або за умови ідеального дзеркального відбиття на бічних межах, всі фонони, випромінювані нагрівачем, досягають холодного резервуара, і навпаки. За цих умов (максимальний?) тепловий потік від нагрівача до тепловідводу описується наступним виразом (дійсним у межах невеликих різниць температур):

$$\Phi_0 = \Phi_h - \Phi_c = \frac{1}{2} V \frac{(T_h - T_c)}{L} L \int \varepsilon \frac{\partial f}{\partial T} \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \frac{1}{2} V C (T_h - T_c). \quad (51)$$

Далі ми розглянемо дифузне відбиття від бічних стінок, тобто можливість того, що фонони розсіюються назад у напрямку нагрівача. Щоб описати цю ситуацію, ми вводимо поняття ймовірності проходження, яке визначається як ймовірність того, що фонон, випромінений нагрівачем, досягне поглинача, а не повернеться до нагрівача внаслідок взаємодії з бічними стінками зразка. У цьому випадку загальний (чистий) тепловий потік визначається таким чином:

$$Q = \Phi_0 \Gamma \equiv \kappa \frac{(T_h - T_c)}{L}. \quad (52)$$

Слід зазначити, що така альтернативна фізична інтерпретація обговорюваних процесів використовується з часів піонерської роботи Клаузинга [3] і в багатьох наступних дослідженнях, як для класичних газів, так і для квазічастинок. Цей підхід, по суті, представляє основну ідею формалізму Ландауєра [17] і широко використовується для опису транспортних властивостей у квантових і нанорозмірних системах [18].

Як приклад можна навести розрахунки теплопровідності в одновимірних фононних системах — нанопроводах — де було введено поняття кванту теплопровідності [19], або дослідження впливу дефектів на коефіцієнт теплопровідності в одновимірних наноструктурах [20].

Вираз (32-52?) для теплового потоку можна використовувати для визначення як теплопровідності зразка

$$\kappa = \frac{1}{2} V L C P_t \quad (53)$$

а середня довжина вільного пробігу фононів у такій геометрії може бути виражена як:

$$\Lambda = \frac{3}{2} L P_t. \quad (54)$$

Ймовірність P_t можна інтерпретувати як нормалізований тепловий потік $P_t = \frac{Q}{\Phi_0} \equiv q_c$ що переноситься фононами, які досягають тепловідводу. Еквівалентно, P_t можна визначити з балансу теплового потоку фононів, тобто шляхом віднімання від загального нормалізованого випромінюваного потоку частки фононів q_h які розсіюються назад у напрямку нагрівача:

$$P_t = q_c = 1 - q_h \quad (55)$$

У свою чергу, тепловий потік q_h визначається просторовим розподілом інтенсивності випромінювання фононного потоку вздовж бічних стінок:

$$q_h = \frac{\Gamma}{S} \int_0^L g(x) \Phi(x) dx \quad (56)$$

Обчислюючи цей інтеграл у лінійній моделі отримуємо остаточний вираз для ймовірності:

$$P_t = 1 - \frac{\Gamma}{2S} \left((1 + \Delta\Phi) I_0(L) - \frac{2\Delta\Phi}{L} I_1(L) \right) \quad (57)$$

де $I_1 = \int_0^L xg(x)dx$ як визначено рівнянням (40) і $I_0 = \int_0^L g(x)dx$.

Для циліндричного стрижня [9] маємо:

$$P_t(D, L) = 1 - \frac{4}{D} \left(\frac{(1+\Delta\Phi)}{2} I_0 - \frac{\Delta\Phi}{L} I_1 \right). \quad (58)$$

Тут значення $\Delta\Phi$ визначається рівнянням (33) та інтегралами

$$I_0 = \frac{1}{2D} L \left(\sqrt{D^2 + L^2} - L \right) \quad (59)$$

і

$$I_1 = \frac{1}{3D} \left\{ (D^2 + L^2)^{\frac{3}{2}} - D^3 - \frac{3}{2} D^2 \left(\sqrt{D^2 + L^2} - D \right) - L^3 \right\} \quad (60)$$

Ці вирази разом з рівнянням 54 дозволяють отримати явні рівняння для середньої довжини вільного пробігу фононів, які є дійсними для довільних співвідношень довжини до діаметра. Це, зокрема, дозволяє нам розглянути граничний випадок довгих зразків, де середня довжина вільного пробігу має вигляд:

$$\Lambda = \frac{7}{4} D \quad (61)$$

Цей результат майже вдвічі перевищує відомий вираз для випадку прикладеного температурного градієнта, наведений у рівнянні (45).

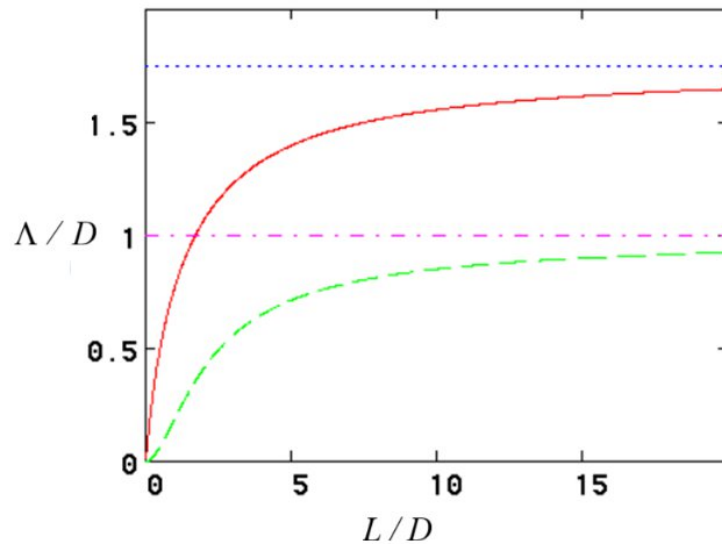


Рисунок 10. На рисунку порівняно середні довжини вільного пробігу фононів, що визначають теплопровідність у двох ситуаціях: при застосуванні температурного градієнта (44) – зелена лінія, та при накладенні скінченної різниці температур (54) – червона лінія. Горизонтальні лінії показують відповідні граничні значення для нескінченно довгих провідників (45) (фіолетова лінія) і (61) (синя лінія), що допомагає визначити, де ці обмеження залишаються дійсними.

Подібна розбіжність була виявлена для двовимірних провідників (див. рис. 5 у [6]), де наша модель передбачає більші середні довжини вільного пробігу порівняно з моделлю Казіміра для співвідношень L/W , більших за 1.

Ця розбіжність також з'являється в аналізі стрижневих структур з прямокутним поперечним перерізом, представленим нижче. Причини цієї розбіжності будуть розглянуті після розгляду прямокутного випадку.

Для прямокутного випадку з загального рівняння (57) маємо

$$P_t(a,b,L) = 1 - \frac{2(a+b)}{ab} \left((1 + \Delta\Phi) I_0(L) - \frac{2\Delta\Phi}{L} I_1(L) \right) \quad (61)$$

Тут значення $\Delta\Phi$ визначається рівнянням (34), інтеграл I_1 визначається рівнянням (47), а інтеграл

$$I_0 = \frac{1}{a+b} \left\{ \frac{ab}{2} + \frac{aL}{\pi} \arctg\left(\frac{a}{L}\right) + \frac{bL}{\pi} \arctg\left(\frac{b}{L}\right) - \frac{a\sqrt{L^2+b^2}}{\pi} \arctg\left(\frac{a}{\sqrt{L^2+b^2}}\right) - \right. \\ \left. - \frac{b\sqrt{L^2+a^2}}{\pi} \arctg\left(\frac{b}{\sqrt{L^2+a^2}}\right) - \frac{1}{2\pi} L^2 \ln \frac{(a^2+L^2)(b^2+L^2)}{L^2(a^2+b^2+L^2)} \right\} \quad (62)$$

У граничному випадку довгих вибірок цей результат призводить до наступного співвідношення:

$$\Lambda = \frac{3}{2} \left(\frac{ab}{(a+b)} + \frac{1}{2} \left\{ b \ln \left\{ \frac{a + \sqrt{a^2 + b^2}}{b} \right\} + a \ln \left\{ \frac{b + \sqrt{a^2 + b^2}}{a} \right\} + \frac{1}{3} \frac{\left\{ -(a^2 + b^2)^{\frac{3}{2}} + a^3 + b^3 \right\}}{ab} \right\} \right) \quad (63)$$

що спрощується до:

$$\Lambda = \frac{3}{4} \left(b \ln \left\{ \frac{a + \sqrt{a^2 + b^2}}{b} \right\} + a \ln \left\{ \frac{b + \sqrt{b^2 + a^2}}{a} \right\} - \frac{1}{3ab} \left\{ (a^2 + b^2)^{\frac{3}{2}} - a^3 - b^3 \right\} \right)$$

Цей вираз відрізняється від результату Казіміра [2] і Маріса [8] наявністю додаткового першого члена, який за порядком величини близький до другого члена. Фізична відмінність між цими членами пояснюється тим, що, хоча залежність від температури наближається до лінійного профілю із збільшенням довжини зразка L відхилення температур поблизу нагрівача і тепловідводу від температур нагрівача і тепловідводу мають порядок $a, b/L$.

Насправді ці відхилення генерують додатковий потік фононів, також порядку $a(b)/L$. Водночас потік фононів, пов'язаний з лінійним градієнтом температури, заданий другим членом, формально має аналогічно мале значення порядку $a, b/L$. Отже, обидва внески виявилися одного порядку величини. Отже, щоб порівняти ці члени, ми можемо розглянути випадок квадратного поперечного перерізу ($b = a$), коли досягається максимальна близькість цих членів і загальний вираз спрощується до:

$$\Lambda = \frac{3}{2} a \left(\frac{1}{2} + \ln(1 + \sqrt{2}) - \frac{\sqrt{2}-1}{3} \right) = \frac{3}{2} a \cdot (0.5 + 0.743) \quad (64)$$

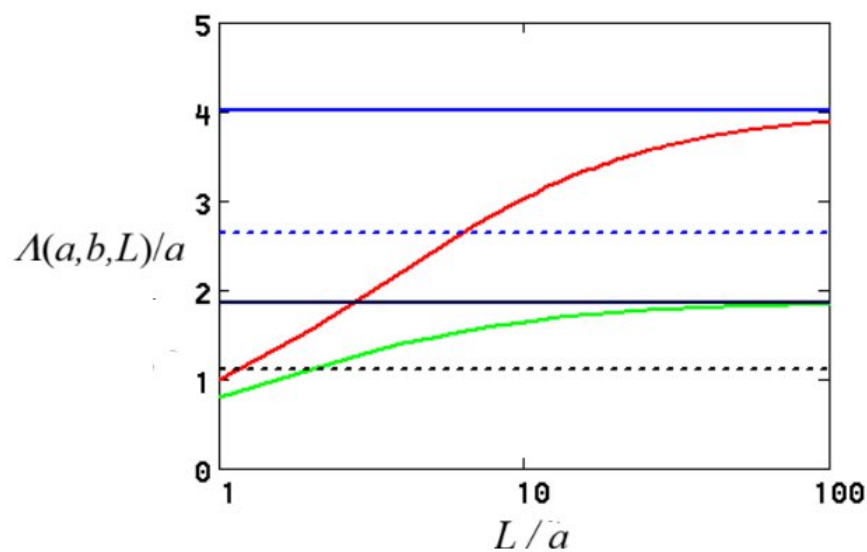


Рисунок 10. На рисунку порівняно середні довжини вільного пробігу фононів (61), що визначають теплопровідність для різних співвідношень ширини до висоти $b = a$ (червона лінія) і $b = 10a$ (зелена лінія) к функцію співвідношення ширини до довжини. Горизонтальні лінії показують відповідні граничні значення для нескінченно довгих

провідників (45) і (61), що допомагає визначити, де ці межі залишаються дійсними в двох ситуаціях: при застосуванні температурного градієнта (44) – пунктирні горизонтальні лінії, і при накладенні скінченної різниці температур (54) – суцільні горизонтальні лінії.

Різниця, про яку ми говоримо, виникає через те, що температура внутрішнього провідника поблизу нагрівача та охолоджувача завжди відхиляється від їхніх відповідних температур. Це залишається правдою навіть у випадку дуже довгих провідників. Така ситуація є цілком аналогічною до добре відомого ефекту у фізичній кінетиці: поблизу нагрітих тіл температура газу завжди демонструє нерівномірність, що визначається середньою довжиною вільного пробігу частинок.

У нашому випадку балістичного фононного транспорту цей стрибок температури викликаний зміною фазового об'єму квазічастинок, які досягають певної точки стінки в міру збільшення відстані від нагрівача (або тепловідводу).

Як типовий приклад розглянемо циліндричний провідник (див. рис. 6 для циліндричного випадку або рис. 7 для прямокутного випадку). Ми спостерігаємо, що для співвідношення 1/10 відхилення температури становить приблизно 0,1. Водночас частка фононів, які досягають охолоджувача після виходу з нагрівача (що визначають тепловий потік), також становить близько 0,1, тобто має той самий порядок величини.

Тобто внесок у тепловий потік, що виникає через невелике відхилення температури поблизу нагрівача та тепловідводу, є такого ж порядку, як і вже невеликий тепловий потік для такого довгого провідника.

3.7. Обговорення та висновки розділу

Метою цього розділу було показати, що у випадку балістичного руху фононів, коли вони переміщуються без взаємодії, теплові властивості системи визначаються не лише геометрією провідника, а й експериментальною конфігурацією.

У найпростішому випадку теоретична задача Кнудсена для ідеального класичного газу розв'язується з накладеним лінійним градієнтом тиску. Однак експерименти, на яких базується ця теорія, зазвичай організовуються інакше: на кінцях труби підтримується задана різниця тиску або температури. Цю постановку вперше розглянув Clausius, який врахував скінченні розміри труби. Подібний підхід застосовний і до фононів: перші дослідження з використанням газо-кінетичного опису розглядали просту теоретичну модель із фіксованим градієнтом температури на стінках провідника (наприклад, роботи Casimir та Ziman).

Варто зазначити, що обидві концепції можуть бути реалізовані експериментально для фононів. Наприклад, у випадку провідника, підтриманого на підкладці, градієнт температури може бути створений у підкладці, а тепловий потік вимірюється безпосередньо в провіднику. Водночас експерименти часто проводяться із підвішеними провідниками, які з'єднують нагрівач і холодильник, розташовані у вакуумі. Така постановка повністю відповідає класичній задачі з фіксованими температурами на кінцях провідника.

Як показано у цій роботі, результати розрахунків для різних постановок задач можуть значно відрізнятися. Отже, вибір відповідної постановки для визначення

теплопровідності або теплового потоку має визначатися виходячи з фактичної експериментальної конфігурації.

Крім того, отримані аналітичні результати виявляються універсальними та дійсними для будь-якого співвідношення розмірів провідника. Відомі формули, виведені для довгих провідників, дають коректні значення лише тоді, коли провідник справді достатньо довгий. У протилежному випадку вони можуть значно відрізнятись від точного розв'язку.

Таким чином, робота підкреслює необхідність уважного порівняння теоретичної моделі з реальною експериментальною установкою, особливо за умов балістичного переносу тепла фононами, і демонструє обмеження традиційних наближень для коротких або середньої довжини провідників.

ВИСНОВКИ

У результаті проведеного дослідження були отримані нові результати щодо теплопереносу фононів у мікро- та нанопровідниках, які суттєво доповнюють і узагальнюють класичні підходи, такі як режим Кнудсена для розрідженого газу та модель Казіміра для теплового потоку фононів у циліндричних провідниках. Основною відмінністю нашого підходу є врахування реальних граничних умов: у класичних моделях уздовж бічної стінки провідника накладається сталий градієнт температури, тоді як у нашій моделі теплові різниці підтримуються на кінцях провідника, що відповідає сучасним експериментальним установкам. Крім того, у класичних моделях часто розглядається ідея нескінченно довгого провідника, що не відображає реальні геометричні обмеження сучасних наноструктур і мікропровідників. Врахування цих двох факторів дозволяє отримати більш точний і загальний опис теплового потоку, включно зі скінченною довжиною провідника, що узагальнює формули для Кнудсенового обмеження.

Проведене дослідження також підкреслює важливість впливу геометрії провідника, характеристик його поверхні та граничних умов на розподіл теплового потоку та ефективну теплопровідність. Встановлено, що навіть невеликі зміни в умовах експерименту або в розмірах провідника можуть приводити до суттєвих відмінностей у поведінці системи. Це підтверджує необхідність уважного узгодження теоретичних моделей з конкретними експериментальними конфігураціями та підкреслює обмеження традиційних наближень для коротких і середніх провідників.

Отримані результати мають практичне значення для моделювання теплопереносу у наноструктурах, тонких плівках та мікропровідниках, де балістичні та напівбалістичні режими переносу фононів відіграють ключову роль. Використання інтегральних рівнянь для опису розподілу фононів, врахування як дифузного, так і дзеркального відбиття від поверхні, дозволяє передбачати теплові характеристики провідників різних геометрій та розмірів. Це створює надійну основу для розробки високоефективних матеріалів, мікроелектронних та нанотехнологічних пристроїв, а також для оптимізації теплового менеджменту в сучасних системах.

Загалом, проведена робота демонструє, що точне моделювання теплопереносу на мікро- та наномасштабі потребує врахування як квантово-хвильових ефектів фононів, так і реальних граничних умов та геометричних обмежень. Результати дослідження узагальнюють класичні теоретичні підходи та відкривають нові можливості для аналізу і прогнозування поведінки теплових потоків у сучасних наноматеріалах і пристроях.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. R.Clausing, “Über die strömung sehr verdünnter gase durch röhren von beliebiger länge”, *Annalen der Physik* 404, 961–989 (1932) <https://doi.org/10.1002/andp.19324040804>
2. H.B.G. Casimir, *Physica* 5, 495 (1938).
3. Knudsen M., *Kinetic Theory of Gases*, 1934. Knudsen M., *Ann. Der Physik* 28 (1909), Smoluchowski M., *Ann. Der Physik* 33 (1910).
4. T. Klitsner, J. E. VanCleve, H. E. Fischer, and R. O. Pohl, *Phys. Rev. B* 38, 7576 (1988). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.7576>
5. M. Perlmutter, R. Siegel, *J. Heat Transfer*, 85, 55-62 (1963).
6. J. Amrit, K. Nemchenko, T. Vikhtinskaya, *J. Appl. Phys.* 129, 085105 (2021).
7. J. M. Ziman, *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids* (Oxford University Press, Oxford, 2001).
8. H. J. Maris, S. Tamura, *Phys. Rev. B*, 85, 054304 (2012).
9. J. Amrit, K. Niemchenko, Ye. Niemchenko, S. Rogova, T. Vikhtynska; Heat transfer in conductors of cylindrical cross-section. *Low Temp. Phys.* 1 January 2025; 51 (1): 37–42.
10. J. Amrit, K. Nemchenko, Ye. Nemchenko, S. Rogova, A. Tonkonozhenko, T. Vikhtinskaya, Phonon thermal conductance of 3D conductors of rectangular cross-section in the ballistic regime V International Conference “Condensed Matter & Low-Temperature Physics” June 2 – 6, 2025, Kharkiv, Abstracts Book p. 49.
11. E. M. Sparrow, *Radiation Heat Transfer, Augmented Edition*, Routledge (CRC Press) (1978). ISBN: 0-89116-923-7 / 978-0-89116-923-9.
12. Michael F. Modest and Sandip Mazumder, *Radiative Heat Transfer*, Academic Press (2021). ISBN: 978-0-12-818142-3 / 978-0-32-398407-2.
13. Jay Amrit, Igor Kudriavtsev, Kostiantyn Niemchenko, Yehor Niemchenko, Mykyta Spotar, Akim Tonkonozhenko, Tetiana Vikhtynska; Analytical approaches to describe phonon heat transfer in two-dimensional nanoconductors. *Low Temp. Phys.* 1 September 2025; 51 (9): 1102–1109. <https://doi.org/10.1063/10.0038995>
14. Polyanin and A. V. Manzhirov, *Handbook of integral equations* (Chapman and Hall/CRC, 2008).
15. J. Amrit, T. Medintseva, K. Niemchenko, Ye. Niemchenko, S. Rogova, M. Spotar, A. Tonkonozhenko, T. Vikhtynska; Influence of specular factor on heat transport in nanoribbons of different sizes. *Low Temp. Phys.* 1 October 2024; 50 (10): 891–897. <https://doi.org/10.1063/10.0028629>
16. J. Amrit, T. Medintseva, Ye. Nemchenko, K. Nemchenko, M. Spotar, S. Rogova, T. Vikhtinskaya; Analytical description of phonon heat flow with diffusive boundary scattering. *Low Temp. Phys.* 1 August 2023; 49 (8): 961–966.
17. R. Landauer, Spatial Variation of Currents and Fields Due to Localized Scatterers in Metallic Conduction, *IBM J. Res. Dev.* 1, 223 (1957).
18. C. Jeong, S. Datta, and M. Lundstrom, Thermal Conductivity of Bulk and Thin-Film Silicon: A Landauer Approach, *J. Appl. Phys.* 111, (2012).
19. K. Schwab, E. A. Henriksen, J. M. Worlock, and M. L. Roukes, Measurement of the Quantum of Thermal Conductance, *Nature* 404, 974 (2000).
20. J. Amrit, T. Medintseva, K. Nemchenko, T. Vikhtinskaya; Probabilistic description for quasiparticle heat transport. *J. Appl. Phys.* 28 June 2022; 131 (24): 244302.