

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ**

«На правах рукопису»
УДК 536.244:621.438

ДО ЗАХИСТУ ДОПУЩЕНО
Завідувач кафедри

_____ Монастирський Г. Є.

«__»_____ 2025 р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра
за освітньо-науковою програмою
зі спеціальності 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»
на тему: «Моделювання ефективної теплопровідності наноматеріалів методами
молекулярної динаміки»**

Виконала:
студентка 2 курсу, групи ФФ-31мн
Суханевич Олександра Сергіївна _____

Науковий керівник:
к.ф.-м.н., доц. каф ПФ,
Кондаков Володимир Олександрович _____

Консультант:
к.ф.-м.н., доц. каф ПФ,
Гільчук Андрій Володимирович _____

Рецензент:
к.ф.-м.н., доц. каф ПФ,
Пономаренко Сергій Миколайович _____

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає
запозичень з праць інших авторів без відповідних
посилань.

Студентка _____

Київ – 2025 року

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність, 105 Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Монастирський Г. Є.

«___» _____ 2025 р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студентці

Суханевич Олександрі Сергіївні

1. Тема дисертації «Моделювання ефективної теплопровідності наноматеріалів методами молекулярної динаміки», науковий керівник дисертації Кондаков Володимир Олександрович, доцент кафедри прикладної фізики, затверджені наказом по університету від «20» березня 2025 р. № 1199-с
2. Строк подання студентом дисертації «12» травня 2025 р.
3. Об'єкт дослідження: теплофізичні властивості наноматеріалів.
4. Предмет дослідження: розрахунок методами молекулярної динаміки ефективної теплопровідності наноматеріалів на основі Si, Ge та MoS₂
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: Аналіз та обробка літературних оглядів інших робіт стосовно методів вимірювання та моделювання теплопровідності наноматеріалів; порівняння ефективності двох підходів молекулярної динаміки — рівноважної та нерівноважної; оцінка впливу

товщини на ефективну теплопровідності кремнієвих та наноплівочок у напрямку товщини методами молекулярної динаміки та визначення теплопровідності відповідного об'ємного матеріалу на основі отриманих результатів; визначення температурної залежності ефективної теплопровідності кремнієвих та германієвих наноплівочок та моношару дисульфіда молібдена методами молекулярної динаміки; дослідження площинної теплопровідності моношарового MoS_2 у залежності від довжини та ширини зразка; моделювання залежності теплопровідності нанопористих метаматеріалів від радіуса пор.

6. Перелік ілюстративного матеріалу: презентація – 26 слайдів.

7. Орієнтовний перелік публікацій:

- О. С. Суханевич, А. В. Гільчук, Р. В. Суханевич, «Моделювання теплопровідності тонких плівок германію методами нерівноважної молекулярної динаміки», ХХІІ Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», Київ, Україна, 2024, с. 48 — 52;
- O. Sukhanevych, A. Gilchuk, R. Sukhanevych, "Prediction of the thermal contact resistance of Si-SiO₂-HfO₂ nanostructure by molecular dynamics method", 12th International Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2024);
- O. Sukhanevych, R. Sukhanevych and A. Gilchuk, "Exploring Nanoscale Heat Transfer: Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Effective Thermal Conductivity in Silicon Nanofilms," 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2024, pp. 320-324, doi: 10.1109/ELNANO63394.2024.10756939;

- О. С. Суханевич, А. В. Гільчук, Р. В. Суханевич, «Моделювання ефективної теплопровідності моношарового дисульфиду молібдена та метаматеріалів методами молекулярної динаміки», XXIII Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», Київ, Україна, 2025.

Дата видачі завдання: «18» жовтня 2023 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Строк виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1.	Пошук та опрацювання літератури за темою МД	18.10.2023 – 10.11.2024	Виконано
2.	Написання першого розділу МД	15.11.2024 – 05.01.2025	Виконано
3.	Постановка мети та завдання дослідження	07.01.2025 – 15.01.2025	Виконано
4.	Розробка комп'ютерної моделі	20.01.2025 – 02.02.2025	Виконано
5.	Проведення тестових розрахунків моделі	03.02.2025 – 10.02.2025	Виконано
6.	Написання другого розділу МД	15.02.2025 – 10.03.2025	Виконано
7.	Виконання основних розрахунків	11.03.2025 – 11.04.2025	Виконано
8.	Аналіз результатів моделювання	11.04.2025 – 20.04.2025	Виконано
9.	Написання третього розділу МД	20.04.2025 – 25.04.2025	Виконано
10.	Написання висновків	25.04.2025 – 27.04.2025	Виконано
11.	Оформлення МД	27.04.2025 – 02.05.2025	Виконано
12.	Підготовка презентації та доповіді	02.05.2025 – 07.05.2025	Виконано
13.	Передзахист МД	12.05.2025	Виконано
14.	Подання роботи на анти-плагіат та нормоконтроль	12.05.2025	Виконано
15.	Захист МД	23.05.2025	Виконано

Студентка

(підпис)

Суханевич О.С.

Науковий керівник дисертації

Кондаков В.О.

(підпис)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка магістерської дисертації за обсягом становить 74 сторінки, містить 25 рівнянь, 4 таблиці та 20 рисунків. Для дослідження було використано 63 бібліографічних найменування.

Актуальність теми зумовлена зростаючими тепловими навантаженнями в сучасних мікро- та нанoeлектронних пристроях, де висока щільність інтеграції компонентів і потужність тепловиділення понад 1 кВт/см² створюють серйозні виклики для ефективного охолодження. Особливо гостро проблема постає у 2.5D та 3D гетерогенних структурах, де локальний перегрів та підвищений термічний опір призводять до деградації матеріалів і зниження надійності. Зменшення розмірів транзисторів до нанометрових масштабів, згідно із законом Мура, спричиняє перехід від дифузійного до балістичного режиму теплопереносу, що вимагає застосування нових підходів на основі молекулярної динаміки для точного опису квантових та міжатомних ефектів. Окрім задач тепловідведення, дедалі важливішим стає питання утилізації тепла, зокрема через термоелектричні ефекти. Проте для підвищення ефективності таких систем необхідно зменшити теплопровідність без значної втрати електропровідності, що можна реалізувати шляхом наноструктурування, зокрема впровадженням періодичних нанопор у таких матеріалах, як кремній та дисульфід молібдену. Моделювання на атомному рівні дозволяє оптимізувати ці структури й забезпечити нові можливості для розробки вискоефективних теплових і термоелектричних рішень у нанопристроях.

Зв'язок дослідження з науковими програмами, планами, темами.

Дослідження виконано в рамках науково-дослідної роботи “Дослідження явищ переносу в наноматеріалах із застосуванням класичних обчислювальних методів

та алгоритмів штучного інтелекту”, присвяченій отриманню надійних моделей для опису явищ теплопереносу. Авторка брала участь у всіх етапах дослідження: від збору даних і моделювання до обробки результатів і підготовки наукових публікацій.

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є визначення впливу товщини та температури на теплопровідність в напрямку товщини кремнієвих та германієвих наноплівки; впливу температури та геометричних розмірів моношарового листа дисульфиду молібдена на його площинну теплопровідність, а також визначення впливу пористості на площинну теплопровідність метаматеріалів на основі моношарового дисульфиду молібдена та кремнія з періодично розташованими порами та наноплівки кремнія з періодично розташованими порами.

Для досягнення мети було визначено такі завдання:

1. Порівняти ефективність двох підходів молекулярної динаміки — рівноважної та нерівноважної і обрати оптимальний для моделювання обраних матеріалів.
2. Оцінити вплив геометричних на ефективну теплопровідності кремнієвих та германієвих наноплівок у напрямку товщини та дисульфиду молібдена в напрямку площини.
3. Оцінити теплопровідність об’ємного кремнію та об’ємного германію, порівняти їх з табличними значеннями для валідації методу.
4. Визначити температурну залежність теплопровідності в напрямку товщини кремнієвої та германієвої наноплівки у діапазоні температур 300–400 K і площинної теплопровідності MoS_2 в діапазоні 250–450 K.
5. Встановити залежність теплопровідності нанопористих метаматеріалів від параметрів пор.

Об’єкт дослідження. Теплофізичні властивості наноматеріалів.

Предмет дослідження. Розрахунок методами молекулярної динаміки ефективної теплопровідності наноматеріалів на основі Si, Ge та MoS₂.

Методи дослідження. Для моделювання теплопровідності нанорозмірних плівок було обрано відкритий пакет програмного забезпечення LAMMPS.

Наукова новизна одержаних результатів. Проведено комплексне дослідження теплопровідності наноплівки Si, Ge та MoS₂ методами молекулярної динаміки. Показано вплив розмірів і пористості на фононний теплоперенос.

Практичне значення одержаних результатів. Апроксимовані результати можуть бути використані в інженерних розрахунках — зокрема, як вхідні дані для багатомасштабного моделювання типу FEM. Це відкриває можливості для точнішого проєктування систем охолодження на нано- та мікрорівнях.

Апробація результатів дисертації.

Результати були представлені на 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), XXII Всеукраїнській науково-практичній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених “Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики” (Київ, 2024), XXII Міжнародній конференції «Нанотехнології та наноматеріали» (NANO-2024) (Ужгород, 2024) та XXIII Всеукраїнській науково-практичній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених “Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики” (Київ, 2025).

Публікації.

Результати дослідження опубліковані:

- O. Sukhanevych, R. Sukhanevych and A. Gilchuk, "Exploring Nanoscale Heat Transfer: Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Effective Thermal Conductivity in Silicon Nanofilms," 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2024, pp. 320-324, doi: 10.1109/ELNANO63394.2024.10756939;
- О. С. Суханевич, А. В. Гільчук, Р. В. Суханевич, «Моделювання теплопровідності тонких плівок германію методами нерівноважної молекулярної динаміки», XXII Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», Київ, Україна, 2024, с. 48 — 52;
- O. Sukhanevych, A. Gilchuk, R. Sukhanevych, "Prediction of the thermal contact resistance of Si-SiO₂-HfO₂ nanostructure by molecular dynamics method", 12th International Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2024);
- О. С. Суханевич, А. В. Гільчук, Р. В. Суханевич, «Моделювання ефективної теплопровідності моношарового дисульфідіду молібдена та метаматеріалів методами молекулярної динаміки», XXIII Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», Київ, Україна, 2025.

Ключові слова: теплопровідність, наноматеріали, кремній, германій, дисульфід молібдена, LAMMPS, молекулярна динаміка.

SUMMARY

The explanatory note of the master's thesis consists of 74 pages, includes 25 equations, 4 tables, and 20 figures. A total of 63 bibliographic references were used in the research.

Relevance of the topic is driven by the increasing thermal loads in modern micro- and nanoelectronic devices, where the high integration density and power dissipation exceeding 1 kW/cm^2 pose serious challenges for effective cooling. This problem is particularly critical in 2.5D and 3D heterogeneous structures, where local overheating and elevated thermal resistance lead to material degradation and reduced reliability. The continued downscaling of transistor sizes to the nanometer range, in accordance with Moore's law, results in a transition from diffusive to ballistic heat transport. This necessitates new approaches based on molecular dynamics to accurately describe quantum and interatomic effects. In addition to heat dissipation, heat utilization — especially via thermoelectric effects — is gaining importance. However, to increase the efficiency of such systems, it is essential to reduce thermal conductivity without significantly compromising electrical conductivity. This can be achieved through nanostructuring, particularly by introducing periodic nanopores in materials such as silicon and molybdenum disulfide (MoS_2). Atomistic-level modeling enables the optimization of such structures and opens new opportunities for developing high-efficiency thermal and thermoelectric solutions in nanoscale devices.

Connection of the research with scientific programs, plans, and projects. The research was carried out within the framework of the scientific project “Investigation of Transport Phenomena in Nanomaterials Using Classical Computational Methods and Artificial Intelligence Approaches”, aimed at obtaining reliable models for heat transfer

analysis. The author was involved in all stages of the study: from data collection and simulation to processing results and preparing scientific publications.

Aim and objectives of the research. The aim of the research is to determine the effect of thickness and temperature on the thermal conductivity in the direction of thickness of silicon and germanium nanofilms; the effect of temperature and geometric dimensions of a monolayer sheet of molybdenum disulfide on its in-plane thermal conductivity; and to determine the effect of porosity on the in-plane thermal conductivity of metamaterials based on monolayer molybdenum disulfide and Si with periodically arranged pores and silicon nanofilms with periodically arranged pores. To achieve this aim, the following objectives were set:

1. Compare the effectiveness of two molecular dynamics approaches - equilibrium and nonequilibrium - and choose the optimal one for modeling the selected materials.
2. To evaluate the influence of geometric on the effective thermal conductivity of silicon and germanium nanofilms in the thickness direction and molybdenum disulfide in the plane direction.
3. Estimate the thermal conductivity of bulk silicon and bulk germanium, compare them with the tabulated values for method validation.
4. Determine the temperature dependence of the thermal conductivity in the direction of the thickness of silicon and germanium nanofilms in the temperature range of 300-400 K and the in-plane thermal conductivity of MoS_2 in the range of 250-450 K.
5. Determine the dependence of the thermal conductivity of nanoporous metamaterials on pore parameters.

Object of the research. Thermophysical properties of nanomaterials.

Subject of the research. Molecular dynamics-based calculation of effective thermal conductivity in nanomaterials based on Si, Ge, and MoS₂.

Research methods. The LAMMPS open-source molecular dynamics simulator was used to model heat transport in nanoscale thin films.

Scientific novelty of the results. A comprehensive study of the thermal conductivity of Si, Ge, and MoS₂ nanofilms was conducted using molecular dynamics simulations. The influence of geometry and porosity on phonon heat transport was demonstrated, revealing mechanisms relevant to nanoscale heat management.

Practical significance of the results. The approximated results can serve as input data for multiscale simulations, such as finite element modeling (FEM), facilitating more precise thermal management design at nano- and microscale levels.

Presentation of research results. The results were presented at 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), XXII Ukrainian Scientific and Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists “Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics, and Informatics” (Kyiv, 2024), XXII International Conference “Nanotechnologies and Nanomaterials” (NANO-2024) (Uzhhorod, 2024) and XXIII Ukrainian Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists “Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics, and Informatics” (Kyiv, 2025).

Publications. The research results have been published in:

- O. Sukhanevych, R. Sukhanevych and A. Gilchuk, "Exploring Nanoscale Heat Transfer: Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Effective Thermal Conductivity in Silicon Nanofilms," 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO),

Kyiv, Ukraine, 2024, pp. 320-324, doi: 10.1109/ELNANO63394.2024.10756939;

- O. S. Sukhanevych, A. V. Gilchuk, R. V. Sukhanevych, “Modeling the thermal conductivity of germanium thin films by nonequilibrium molecular dynamics”, XXII All-Ukrainian Scientific and Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists “Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics”, Kyiv, Ukraine, 2024, pp. 48-52;
- O. Sukhanevych, A. Gilchuk, R. Sukhanevych, “Prediction of the thermal contact resistance of Si-SiO₂-HfO₂ nanostructure by molecular dynamics method”, 12th International Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2024);
- O. S. Sukhanevych, A. V. Gilchuk, R. V. Sukhanevych, “Modeling the effective thermal conductivity of monolayer molybdenum disulfide and metamaterials by molecular dynamics methods”, XXIII All-Ukrainian Scientific and Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists “Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics”, Kyiv, Ukraine, 2025.

Keywords: *thermal conductivity, nanomaterials, silicon, germanium, molybdenum disulfide, LAMMPS, molecular dynamics.*

Зміст

ВСТУП.....	16
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ.....	17
1.1. Проблеми сучасної електроніки.....	17
1.2. Теплопровідність на нано- і мікро- масштабах.....	20
1.3. Експериментальні методи дослідження теплопровідності на мікро та нано масштабах.....	21
1.4. Підходи до розрахунку і моделювання теплопровідності в мікро та наномасштабах.....	23
1.4.1 Рівняння теплопереносу Больцмана.....	23
1.4.2 Моделювання методами Монте-Карло.....	24
1.4.3 Моделювання молекулярної динаміки.....	26
1.4.4 Рівноважна молекулярна динаміка.....	26
1.4.5 Нерівноважна молекулярна динаміка.....	28
РОЗДІЛ 2. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ.....	31
2.1 Загальні налаштування.....	31
2.2 Моделювання теплопровідності перпендикулярно до площини тонких плівок кремнію.....	33
2.3 Моделювання теплопровідності перпендикулярно до площини тонких плівок германію.....	41
2.4 Моделювання площинної теплопровідності MoS_2	44
2.5 Моделювання площинної теплопровідності метадисульфиду молібдена залежно від радіуса пор.....	49
2.6 Моделювання площинної теплопровідності метананоплівки кремнію залежно від радіуса пор.....	50
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ.....	51

	15
3.1 Теплопровідність наноплівки кремнію.....	51
3.3 Теплопровідність MoS ₂	58
3.4 Теплопровідність метаматеріалів.....	63
ВИСНОВКИ.....	65
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	67

ВСТУП

Розвиток сучасної мікро- та наноелектроніки потребує детального розуміння механізмів теплопереносу в наноструктурованих матеріалах. Тонкі плівки кремнію (Si) та германію (Ge) широко застосовуються в напівпровідникових пристроях, зокрема в транзисторах, де ефективний контроль теплопровідності є критично важливим для запобігання локальному перегріву. Двовимірний дисульфід молібдену (MoS_2) також розглядається як перспективний матеріал завдяки його унікальним електронним і тепловим властивостям.

Одним із підходів керування теплопереносом є створення метаматеріалів— штучно спроектованих структур із заданими властивостями. Зокрема, кремній та MoS_2 можуть використовуватися як основа для термоелектричних метаматеріалів, із низькою теплопровідністю та достатньою електропровідністю. Одним із методів проектування метаматеріалів є впровадження регулярних нанопор. Створення періодичних отворів змінює фононний транспорт, посилюючи розсіювання теплових коливань і зменшуючи теплоперенос. Це сприяє підвищенню термоелектричного коефіцієнта добротності матеріалу.

Незважаючи на швидкий прогрес експериментальних вимірювань, проведення нанорозмірних експериментів у напрямку теплопровідності залишається нетривіальною задачею, оскільки отримані значення можуть бути недостатньо точними через вплив багатьох факторів на результати експерименту. Тому задача розрахунку процесів у нанорозмірних структурах методами молекулярної динаміки є актуальною.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1. Проблеми сучасної електроніки

Попит на високопродуктивні електронні пристрої зумовив потребу в інтеграції кількох функцій в одному чіпі, що призводить до високощільної упаковки [1]. Однак таке збільшення розмірів пристроїв супроводжується значними проблемами термоменеджменту через збільшення потужності та розсіювання тепла, при цьому прогнозується, що для наступних поколінь пристроїв цей показник перевищить $1 \text{ кВт} \cdot \text{см}^{-2}$ [2]. Такі високі теплові потоки можуть викликати проблеми, такі як електроміграція, текучість матеріалів та термічне циклювання, що робить ефективне управління температурою критично важливим для надійної роботи електроніки. Типові електронні компоненти, такі як ядра та кеш-пам'ять, мають нерівномірні щільності потужності, що призводить до локалізованих теплових потоків, що перевищують $100 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$ [3]. Традиційні методи охолодження, такі як пасивне та активне повітряне охолодження, можуть бути недостатніми для відведення цього рівня тепла, особливо в умовах високощільної мікроелектроніки.

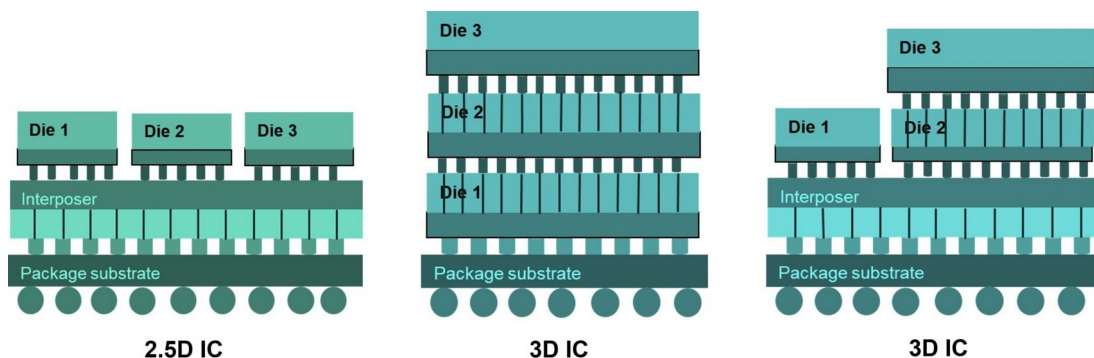


Рисунок 1.1 — Схема 2.5D чіпа та 3D чіпа [63]

Особливо складними для терморегулювання є гетерогенні пакети, зокрема 2.5D і 3D платформи, через їх високу потужність, щільність, складність і необхідність забезпечення ефективного тепловідведення при високих температурах. У 2.5D пакуванні чіпи розташовані на горизонтальній площині, але можуть мати різні температурні режими, що призводить до того, що тепловиділення в кожному блоці може впливати на сусідні блоки, що знижує їх ефективність і надійність. Оскільки потужність чіпів постійно зростає, а їх температура може перевищувати критичні значення, необхідно розробляти рішення для поліпшення терморегулювання.

У 3D пакуванні, де чіпи вертикально укладені, теплові проблеми стають ще складнішими через збільшення термічного опору з кожним додатковим чіпом. Оскільки найгарячіший чіп зазвичай знаходиться найближче до підкладки, він передає тепло через інші чіпи, що призводить до додаткового навантаження на систему охолодження. Рішенням може стати використання теплових канавок або металевих вставок для покращення тепловідведення [4].

Сучасний розвиток електроніки спрямований на зменшення розмірів транзисторів до наномасштабного рівня, що узгоджується з законом Мура, який передбачає експоненціальне зростання обчислювальної потужності через подвоєння кількості транзисторів на кристалі кожні 2 роки. Однак, зменшення розмірів транзисторів спричиняє технічні виклики, зокрема збільшення теплового навантаження в активних зонах транзистора, яке призводить до перегріву затвора та каналу, що, у свою чергу, знижує продуктивність і надійність пристрою та викликає деградацію рухливості носіїв заряду через локальне підвищення температури. Останні розробки у транзисторах із вертикальним каналом (Gate-All-Around, GAA) та тонкоплівкових транзисторах (FinFET, TFET) використовують наноплівки кремнію (Si) та германію (Ge) завтовшки в кілька нанометрів [58-60].

В нано та мікро масштабах традиційні закони теплопереносу, зокрема закон Фур'є, не працюють, оскільки в структурах таких розмірів перенесення тепла не є дифузійним і необхідно враховувати квантові ефекти та специфіку теплопереносу в матеріалах на наномасштабному рівні. Теплові ефекти в таких структурах не можуть бути описані простими рівняннями, а вимагають комплексного моделювання для точного прогнозування теплових потоків і їхнього впливу на ефективність роботи пристроїв.

Для вирішення цих задач важливим є застосування методів молекулярної динаміки для моделювання теплопереносу в нанорозмірних матеріалах. Хоча ми в цій роботі зосереджуємось саме на тонких плівках кремнію та германію, подібні методи можна застосовувати до інших матеріалів на наномасштабному рівні.

Сучасні електронні пристрої виділяють значну кількість тепла під час роботи, яке зазвичай розсіюється без корисного використання. Одним із підходів для підвищення енергоефективності є застосування термоелектричних матеріалів, які проявляють ефекти Зеебека (наприклад, бісмут селенід — Bi_2Se_3 , телурид свинцю — PbTe) та Пельтьє (наприклад, селенід кадмію — CdSe , телурид свинцю — PbTe). Однак основною проблемою термоелектричних матеріалів є їх низька ефективність, оскільки для досягнення високої ефективності потрібно забезпечити одночасно високу електропровідність і низьку теплопровідність, що суперечить закону Відемана-Франца у випадку класичних структур. Одним із способів подолати це обмеження є наноструктурування термоелектричних матеріалів, зокрема розробка метаматеріалів, штучно створених матеріалів, які мають властивості, відмінні від властивостей природних матеріалів завдяки їхній спеціальній структурі. Для підвищення ефективності в термоелектричних застосуваннях розробляються нові матеріали з періодичними нанопорами, наприклад MoS_2 та Si , які дозволяють зменшити теплопровідність без суттєвого

зниження електропровідності. Для знаходження оптимальної конфігурації нанопор у різних структурах дисульфіда молібдена та кремнія для керування ефективною теплопровідністю можуть бути застосовані методи молекулярної динаміки.

1.2. Теплопровідність на нано- і мікро- масштабах

Теплопровідність на наномасштабі суттєво відрізняється від макроскопічної через квантові та поверхневі ефекти. Наприклад, у кремнієвих нанодротах діаметром 56 нм вона в 6 разів нижча, ніж у масивного кремнію, а за низьких температур порядку -253°C – у 7000 разів [5]. У мікроелектроніці та оптоелектроніці (де деякі компоненти <100 нм) знижена теплопровідність ускладнює тепловідведення, тоді як у термоелектричних перетворювачах вона є бажаною [6].

Розглянемо особливості теплопровідності різних матеріалів. Визначальною особливістю металів є велика концентрація вільних електронів, які можуть переміщатися по всьому матеріалу та переносити енергію. Тому електрони є домінуючими переносниками тепла в металах [7]. Натомість у напівпровідниках та діелектриках електрони тісно пов'язані з ядрами, і їхня роль у теплопереносі незначна. Тут тепла енергія передається завдяки атомним коливанням, зокрема акустичним фононам [8]. У металах, крім електронного механізму, існує також фононний внесок у теплоперенос, а електрони й фонони взаємодіють через електрон-фононне розсіяння [9].

Теплопровідність описується рівнянням Больцмана, за умови, що розмір досліджуваної системи більший за довжину хвилі носія теплоти (1):

$$k = \frac{1}{3} C v \Lambda \quad (1)$$

Де C — об'ємна теплоємність;

v — швидкість руху частинки ;

Λ — довжина середнього вільного пробігу частинки.

Вплив розміру зразка особливо помітний у наноструктурах, де теплопровідність залежить від ефективної довжини вільного пробігу фононів. Експериментальні дані підтверджують розмірну залежність теплопровідності для нанодротів і плівок Si та GaAs [11]. У металевих плівках (Au, Cu, Al) через зерномежове та поверхнєве розсіяння теплопровідність значно нижча за об'ємні значення, особливо при низьких температурах [12]. Це важливо для розробки нанопристроїв, де врахування цих ефектів необхідне для оптимізації теплових характеристик та ефективного відведення тепла в мікро- і нанoeлектронних компонентах.

1.3. Експериментальні методи дослідження теплопровідності на мікро та нано масштабах

Вимірювання теплопровідності наноструктур є складним завданням через їхні малі розміри та вплив поверхневих ефектів. Традиційні методи не завжди ефективні, тому застосовуються спеціалізовані підходи:

1. Скануюча тепла мікроскопія (СТМ) використовує тепловий зонд для локального вимірювання температури поверхні. Зонд може працювати в активному режимі (резистивний нагрів) або пасивному (реєстрація теплової

напруги) [13]. Метод забезпечує високу роздільну здатність, але чутливий до контакту зі зразком.

2. Терморефлексія в часовій області є неінвазивним методом вимірювання теплопровідності наноматеріалів (включаючи метали, напівпровідники, ізолятори, тонкі плівки та нанодроти). Імпульсний лазер нагріває поверхню, а зміни температури фіксуються за зміною відбиття світла [19].
3. Метод 3ω вимірює коливання температури матеріалу, спричинені змінним струмом, який генерує електричне поле та викликає теплові потоки. Для тонких плівок вузькі нагрівачі створюють локальний тепловий потік, порівнюючи температуру плівки з підкладкою [14]. Метод дозволяє визначити теплові властивості з точністю 2–4%.
4. Оптотермічний метод на основі раманівської спектроскопії широко застосовується для вимірювання теплопровідності 2D матеріалів. Лазер нагріває зразок, а зміни положення раманівської активної моди використовують для визначення теплопровідності через теплове моделювання [15].
5. Методи на основі атомно-силової мікроскопії (АСМ) дозволяють вимірювати теплопровідність нанодротів, нанотрубок, тонких плівок і багат шарових матеріалів. У [17] тепловий зонд АСМ контактував із нанодротами, і теплопровідність визначали за тепловим потоком. У [18] використано підвішений мікроміст, нагрітий лазером, температура вимірювалася кантилевером АСМ. Висока просторово-часова роздільна здатність робить метод ефективним, але він чутливий до шумів.

Кожен із методів має свої переваги та обмеження. Вибір залежить від досліджуваного матеріалу, просторової роздільної здатності та необхідної точності вимірювань.

1.4. Підходи до розрахунку і моделювання теплопровідності в мікро та наномасштабах

Теплопровідність у мікро- та наномасштабах, де перенесення тепла не є дифузійним, порушує закон Фур'є (тепловий потік пропорційний градієнту температури) [5]. Тому для моделювання використовують молекулярну динаміку, метод Монте-Карло, фононну дисперсію та функції Гріна. Всі методи потребують міжатомної взаємодії, отриманої через перші принципи або експериментальні потенціали.

1.4.1 Рівняння теплопереносу Больцмана

Для визначення теплопровідності на мікро та нано масштабах моделюють квантовані коливання ґратки або фонони як частинки і обчислюють температуру та теплові потоки. Такий підхід пояснюється тим, що при кімнатній температурі домінуючі фонони в матеріалах, таких як Si, мають довжину хвилі менше 10 нм. У цьому випадку транспорт фононів можна змоделювати за допомогою рівняння переносу Больцмана [20], яке ґрунтується на динаміці частинок і описує еволюцію функції розподілу частинок у фазовому просторі через рух в реальному просторі та ангармонічне розсіяння [9].

Згідно з припущенням рівняння переносу Больцмана, зміни в розподілі фононів у малому об'ємі кристалу через градієнт температури відбуваються внаслідок дрейфу та зіткнень. Розсіяння фононів може відбуватися через інші фонони, межі матеріалу, дефекти або домішки. У рівноважному стані не повинно

бути змін у кількості фононів у малому об'ємі, і тому сума термінів, що описують дрейф і зіткнення, повинна бути нульовою [21]:

$$\left. \frac{\partial n(\vec{q})}{\partial t} \right|_c + \vec{v}(\vec{q}) \cdot \nabla_T \frac{\partial n(\vec{q})}{\partial T} = 0 \quad (2)$$

де n - функція розподілу фононів,

$\vec{q}$ — хвильовий вектор фононів,

$\vec{v}$ — групова швидкість,

$\nabla n(\vec{q}) \cdot \vec{v}(\vec{q})$ відповідає швидкості зміни функції розподілу, спричиненої рухами фононів,

$\left. \frac{\partial n(\vec{q})}{\partial t} \right|_c$ відповідає тій самій швидкості зміни внаслідок зіткнень, що призводить до стаціонарного стану [21].

Загалом, одним із найпоширеніших методів розрахунку теплопровідності є першопринципне розв'язання рівняння переносу Больцмана. Алгоритм розрахунку фононної теплопровідності є складним, оскільки для визначення силових констант використовуються класичні потенціали або обрахунок з перших принципів, що є більш точним. Згідно з концепцією трансляційної інваріантності, силові константи повинні задовольняти певним умовам для точних прогнозів. На сьогоднішній день різні пакети дають можливість оцінити теплопровідність за допомогою методу розв'язання рівняння Больцмана: ShengBTE, Quantum Espresso, VASP.

1.4.2 Моделювання методами Монте-Карло

Метод Монте-Карло (МК) використовується для моделювання транспорту фононів і розв'язання рівняння Больцмана, оскільки він дозволяє уникнути повної дискретизації фазового простору. Існують два основних підходи: метод відстеження траєкторії фононів та метод ансамблю фононів [9]. Перший з них моделює траєкторії окремих фононів, які рухаються в матеріалі до того, як розсіюються або досягнуть межі, тоді як метод ансамблю моделює всі фонони одночасно. У методі ансамблю ймовірності розсіювання для всіх пар фононів обчислюються випадковим чином на кожному кроці часу. Хоча цей метод є точнішим, він потребує більше обчислювальних ресурсів. Температура або тепловий потік обчислюються шляхом усереднення результатів для всього ансамблю фононів.

Сучасні методи МК базуються на моделюванні обчислювальних частинок, які представляють фіксовану кількість енергії [22], замість фіксованої кількості фононів [23], що дозволяє зберігати енергію в процесі розсіювання через збереження кількості обчислювальних частинок. Процес розсіювання вимагає знань про локальну температуру на кожному кроці часу, яку можна отримати за допомогою сітки обчислювальних комірок. Це дозволяє зв'язати густину енергії з температурою за допомогою рівноважного розподілу Бозе-Ейнштейна. Статистична невизначеність у таких методах обернена до квадратного кореня з кількості вибірок, що є джерелом похибки.

У роботі [24] досліджується теплопровідність кремнієвих нанодротів, моделюючи рух фононів за допомогою методу МК, що дозволяє розв'язати транспортне рівняння Больцмана з урахуванням дисперсії та взаємодії фононів. Результати цієї моделі добре узгоджуються з експериментальними даними. У

статті [25] розроблений симулятор для розв'язання рівняння Больцмана в наноструктурах кремнію. Встановлено, що фононно-межове розсіювання домінує при малих розмірах кристалів, а неупорядкованість знижує теплопровідність на 60% порівняно з впорядкованою геометрією пор.

1.4.3 Моделювання молекулярної динаміки

Класична молекулярна динаміка (КМД) базується на законах Ньютона, моделюючи траєкторії атомів у системі за допомогою міжатомних потенціалів. Вона описує ґратчасті коливання, що визначають теплопровідність напівпровідників та діелектриків, і не враховує внесок електронів. Квантові методи МД поділяються на рівноважну молекулярну динаміку (РМД) та нерівноважну молекулярну динаміку (НМД), де в РМД моделюється теплопровідність на основі теореми флуктуації-дисипації [26], а в НМД теплоперенос досягається шляхом накладання збурень. НМД методи можна поділити на однорідний [27], зворотний [28] та рівномірний з джерелом і стоком [27].

1.4.4 Рівноважна молекулярна динаміка

Метод Гріна-Кубо використовується для розрахунку теплопровідності в різних матеріалах. Він базується на теоремі флуктуації-дисипації, де теплопровідність пропорційна інтегралу автокореляційної функції теплового

потoku. Теплопровiднiсть ґратки k_α вздовж певного напрямку α задається формулою (3) [29]

$$k_\alpha = \frac{1}{k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle J_\alpha(t) J_\alpha(0) \rangle dt \quad (3)$$

де t — час;

V — об'єм системи;

T — температура в системі;

J_α — α компонента вектора теплового потоку ґратки;

$\langle J_\alpha(t) J_\alpha(0) \rangle$ — усереднена по ансамблю автокореляційна функція теплового потоку;

Вектор теплового потоку решітки можна представити як (4) [29]:

$$\mathbf{J}(t) = \frac{d}{dt} \sum_i \mathbf{R}_i E_i = \sum_i E_i \mathbf{v}_i + \sum_i \mathbf{R}_i \frac{dE_i}{dt} = \sum_i E_i \mathbf{v}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} (\mathbf{F}_{ij} \cdot \mathbf{v}_i) \mathbf{R}_{ij} \quad (4)$$

Де $\mathbf{R}_i$ — вектор положення i -го атома;

$\mathbf{v}_i$ — швидкість i -го атома;

E_i — енергія i -го атома (кінетична та потенціальна);

$\mathbf{F}_{ij}$ — сила взаємодії атомної пари.

Перший доданок у правій частині рівняння (4) відповідає дифузії атомів, тобто є конвекційним членом. Другий доданок — кореляційний, описує передачу енергії між сусідніми атомами.

У роботі [30] використовували метод Гріна-Кубо для прогнозування теплопровідності об'ємних кристалів кремнію і кремнієвих нанодротів та виявили, що теплопровідність кремнієвих нанодротів є меншою порівняно з теплопровідністю об'ємних кристалів кремнію. Дослідники [31] за допомогою метода Гріна-Кубо виявили, що теплопровідність тетрагонального карбона є анізотропною, зі значенням $1200 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ в поперечному напрямку при кімнатній температурі.

У дослідженні [32] використовували метод Гріна-Кубо для розрахунку теплопровідності об'ємного кремнію і ZrO_2 . Автори отримали значення, що добре узгоджуються з експериментальними результатами.

Однак, в розрахунках РМД виникає проблема через те, що підхід Гріна-Кубо спирається на нескінченну шкалу часу, але практичне моделювання має обмежену тривалість. Це можна вирішити через пряме інтегрування (інтеграл замінюють підсумовуванням) автокореляційної функції теплового потоку (5) з поправками для низькочастотних фононів [33].

Таким чином, РМД може забезпечити точні розрахунки термодинамічних властивостей, оскільки моделює систему в стані рівноваги, коли макроскопічні властивості чітко визначені. РМД не вимагає попередніх знань або припущень щодо макроскопічних властивостей, таких як температура або тепловий потік. Ця перевага робить РМД придатним для дослідження фундаментальних механізмів перенесення тепла без необхідності зовнішніх збурень або накладених градієнтів.

1.4.5 Нерівноважна молекулярна динаміка

У нерівноважному методі молекулярної динаміки для моделювання теплопровідності використовують два основні підходи [34]. Перший — це подача постійного теплового потоку на систему, обчислення градієнта температури і визначення ефективної теплопровідності як відношення потоку до градієнта температури. Другий підхід — підтримка постійної температури на межах системи і обчислення теплового потоку. Створення температурного градієнта є ключовим для імітації реальних умов експеримента, що досягається за допомогою термостатів Нозе-Гувера та Ланжевена [9]. Вибір термостата має суттєвий вплив на симуляцію [35]. Дослідження показують, що багат шарова тепла ванна Нозе-Гувера зменшує стрибки температури на межі, тоді як тепла ванна Ланжевена створює лінійний температурний профіль з мінімальними стрибками [36]. Для уникнення абляції атомів теплової ванни встановлюються на двох кінцях системи.

Межове розсіювання фононів на межах розділу обмежує теплопровідність зразків з розмірами, меншими за середню довжину вільного пробігу фононів межею Казимира [37] (ситуація, коли межове розсіювання домінує над внутрішнім розсіюванням) [38]. Для об'ємних матеріалів розмір зразка набагато більший за середню довжину вільного пробігу фононів, тому розмірні ефекти відсутні. Тому для уникнення впливу нерухомої межі на тепловий транспорт накладають періодичні граничні умови [9].

НМД успішно застосовується для дослідження теплового переносу в різних матеріалах і системах. Моделювання теплопровідності тонких плівок аргону показало, що теплопровідність зростає з товщиною плівки, і стабілізується при товщині близько 100 нм. Інше дослідження показало, що теплопровідність нанорозмірних плівок добре узгоджується з теоретичними оцінками при

використанні р-наближення для інтерпретації фононно-межового розсіяння [39]. Моделювання пористих нанотрубчастих мереж також показало, що теплопровідність зростає при збільшенні відстані між переходами, що пояснюється конкуренцією геометричного та провідного факторів [40].

У порівнянні з методом Монте-Карло та розв'язком рівняння Больцмана, які зазвичай вимагають великих спрощень і наближених розрахунків, НМД та РМД дозволяють більш точно відтворювати фізичні процеси, оскільки враховують повну еволюцію атомних систем у часовій та просторовій площинах. Ці методи також здатні працювати з матеріалами складної структури, НМД та РМД також надають велику гнучкість в моделюванні реальних умов експериментів, таких як різноманітні температурні градієнти, що дозволяє отримати точніші оцінки теплопровідності для наноматеріалів. Тому в цій роботі для дослідження теплопровідності нанорозмірних матеріалів будуть використані методи молекулярної динаміки.

РОЗДІЛ 2. МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ

У програмному забезпеченні LAMMPS було змодельовано теплопровідності нанорозмірних матеріалів, зокрема тонких плівок кремнію, германію, одношарового MoS_2 та одношарового MoS_2 із періодично розташованими порами.

Розглянемо більш детально моделювання кожного із зазначених вище матеріалів.

2.1 Загальні налаштування

Для симуляцій був використаний стиль одиниць metal (таблиця 1). Використання цього стилю обумовлено тим, що обрані потенціали вимагають використання саме “metal units”. Стиль одиниць визначає розмірності всіх величин, указаних у вхідному сценарії та файлі даних, а також величини, що виводяться на екран, файл з розширенням “.log” та файли “dump”. LAMMPS використовує фізичні константи з бази даних [51].

На систему були накладені періодичні граничні умови вздовж осей x та y і вільні граничні умови — в напрямку z. Температура в системі задається як

усереднене значення швидкості атомів у локальній області $T = \frac{\langle \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i \rangle}{3 N k_B}$. Для

моделювання фізичних процесів при стабільній температурі в рамках канонічного ансамблю (NVT) на систему накладається термостат Нозе-Гувера. Термостат впливає на швидкості частинок шляхом регулювання їхньої енергії так, щоб

температура системи відповідала заданій. На кожному кроці часу обчислюється температура системи, що визначається через кінетичну енергію частинок.

Таблиця 1 — Стиль одиниць *metal* [52]

Величина	Розмірність
Маса	г/моль
Відстань	Å
Час	пс
Енергія	eV
Швидкість	Å/с
Сила	eV/Å
Крутний момент	eV
Температура	К
Тиск	Бар
Динамічна в'язкість	П
Заряд	кратний заряду електрона (1,0 — це для протона)
Диполь	Заряд·Å
Електричне поле	В/Å
Щільність	г/см ³

Якщо температура відрізняється від заданої, термостат коригує швидкості атомів таким чином, щоб вона наближалася до бажаного значення. Цей процес описується за допомогою рівнянь Нозе-Гувера (6-7). Було визначено, що оптимальний часовий крок моделювання становить 1 фс для всіх модельованих систем. LAMMPS використовує списки сусідів (neighbor), які оновлюються через певну кількість кроків (в даних моделюваннях — кожен крок), якщо часовий крок великий, то атоми можуть швидко змінювати положення, це призводить до того, що список сусідів стає нерелевантним, що призводить до нестабільності та втрати атомів.

2.2 Моделювання теплопровідності перпендикулярно до площини тонких плівок кремнію

Теплопровідність тонких плівок кремнію товщиною 0.5 нм, 1 нм, 2 нм, 3 нм, 5 нм, 10 нм та 20 нм була змодельована методом нерівноважної молекулярної динаміки. Зображення модельованої плівки товщиною 2 нм представлена на рисунку 2.1.

Початкова конфігурація системи створювалася шляхом розташування атомів у визначених частинах простору відповідно до кристалічної решітки кремнію, що має алмазоподібну кубічну кристалічну структуру. Кожен атом у вузлі решітки оточений чотирма сусідніми атомами у тетраедричній координації. Параметри ґратки складають приблизно 5.43 Å.

Обрані кристалографічні орієнтації – [100] вздовж вісі x, [010] вздовж вісі y та [001] вздовж вісі z (рис.2.2).

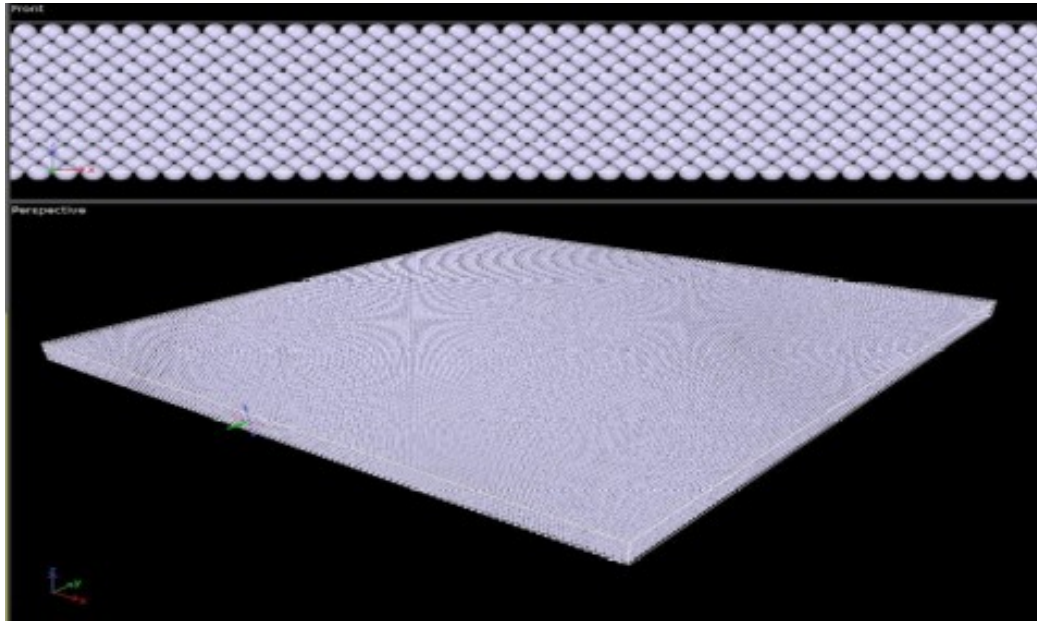


Рисунок 2.1 — Плівка кремнію товщиною 2 нм [54]

Для вибору розмірів плівок вздовж Ox та Oy порахуємо довжину вільного пробігу в об'ємному кремнії та в кремнієвій плівці.

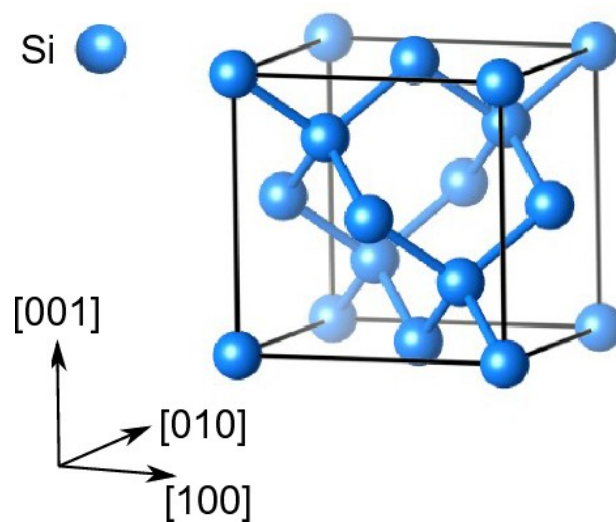


Рисунок 2.2 — Комірка кристалічної решітки кремнія [55]

З рівняння Больцмана (1) отримаємо вираз для середньої довжини вільного пробігу фононів в об'ємному матеріалі (9):

$$\Lambda_b = \frac{3k}{C \cdot v} \quad (9)$$

Де C — об'ємна теплоємність;

k — теплопровідність;

v — швидкість звуку в матеріалі.

Для кремнія отримаємо $\Lambda_b \approx \frac{3 \cdot 149}{1.66 \cdot 10^6 \cdot 8400} \approx 32 \text{ нм}$. У тонких плівках довжина пробігу визначається рівняннями Фукса-Зондгаймера залежно від товщини плівки та довжини вільного пробігу у відповідному об'ємному матеріалі. Якщо товщина плівки значно перевищує довжину вільного пробігу, застосовується рівняння (10), а в протилежному випадку – (11).

$$\frac{\Lambda}{\Lambda_b} = \left(1 + 3 \frac{\Lambda_b}{8} L\right)^{-1} \quad (10)$$

$$\frac{\Lambda}{\Lambda_b} = \frac{3}{4} \frac{L}{\Lambda_b} \ln\left(\frac{\Lambda_b}{L}\right) \quad (11)$$

Де Λ — довжина вільного пробігу в плівці;

L — товщина плівки;

Λ_b — довжина вільного пробігу у відповідному об'ємному матеріалі.

З урахуванням того, що досліджувані товщини в рази менші за довжину вільного пробігу в об'ємному кремнії, для плівки товщиною 1 нм отримаємо:

$$\Lambda = \frac{3}{4} L \ln\left(\frac{\Lambda_b}{L}\right) = \frac{3}{4} \ln(32) \approx 2.6 \text{ нм} \quad (12)$$

Для плівки товщиною 2 нм довжина вільного пробігу становитиме 4.2 нм, для плівки товщиною 3 нм — 5.3 нм, для плівки товщиною 4 нм — 6.2 нм, а для плівки товщиною 5 нм — порядку 7 нм. З урахуванням отриманих значень було вирішено моделювати плівки довжиною 70 нм та шириною 70 нм для мінімізації розмірного ефекту.

Міжатомні взаємодії Si-Si характеризуються потенціалом Терсоффа (13-20) [54]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (13)$$

Тут E — повна енергія системи, V_{ij} — енергія зв'язку, яка описується рівнянням (14):

$$V_{ij} = f_C(r_{ij} + \delta) [f_R(r_{ij} + \delta) + b_{ij} f_A(r_{ij} + \delta)] \quad (14)$$

Де r_{ij} — відстань від i -го атома до j -го атома;

f_c — це функція плавного відсікання (15) для обмеження діапазону потенціалу. Для багатьох застосувань функції короткого діапазону дозволяють значно зменшити обчислювальні витрати.

$$f_c = \begin{cases} 1, & r < R-D \\ \frac{1}{2-\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{r-D}{D}\right), & R-D < r < R+D \\ 0 & r > R+D \end{cases} \quad (15)$$

Функція f_R описує відштовхувальний парний потенціал, що враховує енергію ортогоналізації при перекритті атомних хвильових функцій (16).

$$f_R(r) = A \exp(-\lambda_1 r) \quad (16)$$

Функція f_A відповідає за потенціал притягання, що пов'язаний з утворенням хімічного зв'язку (17).

$$f_A(r) = -B \exp(-\lambda_2 r) \quad (17)$$

Величина b_{ij} характеризує порядок зв'язку (18).

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (18)$$

Параметр ζ_{ij} (19) описує кутові ефекти, і залежить від кількості парних потенціальних зв'язків. Ефективне координаційне число атома і враховує відносну відстань між двома сусідніми атомами $r_{ij}-r_{ik}$, а параметр λ визначає силу зв'язку, θ_{ijk} — кут між зв'язками ij та ik .

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik} + \delta) g[\theta_{ijk}(r_{ij}, r_{ik})] \exp[\lambda_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m] \quad (19)$$

Функція $g(\theta)$ визначається як (20):

$$g(\theta) = \gamma_{ijk} \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (\cos \theta - \cos \theta_0)^2} \right) \quad (20)$$

Значення параметрів для опису міжатомної взаємодії Si-Si потенціалом Терсоффа наведені в таблиці 2.

Таблиця 2 — Параметризація міжатомної взаємодії Si-Si [54]

Параметр	Розмірність	Значення
m	—	3
γ	—	1
$\lambda_3 [1/\text{\AA}]$	$1/\text{\AA}$	1.3258
c	—	4.8381
$\cos \theta_0$	—	0
n	—	22.956
β	—	0.33675

Продовження Таблиці 2 — Параметризація міжатомної взаємодії Si-Si [54]

$R[\text{\AA}]$	$\text{\AA}$	3.0
$D[\text{\AA}]$	$\text{\AA}$	0.2
$\lambda_1[1/\text{\AA}]$	$1/\text{\AA}$	3.2394
$\lambda_2[1/\text{\AA}]$	$1/\text{\AA}$	1.3258
$B[\text{eV}]$	eV	95.373

Після накладання потенціалів виконується мінімізація енергії системи шляхом ітеративного коригування координат атома.

Модельована система релаксує та приходить до стану рівноваги в канонічному ансамблі (NVT) за температури T_0 протягом 30 пс.

Область моделювання вздовж напрямку z поділена на 3 області рис. 2.3: холодний резервуар товщиною 1 елементарна комірка, робоча зона, товщина якої залежить від товщини модельованого зразка та гарячий резервуар, товщиною 1 елементарна комірка.

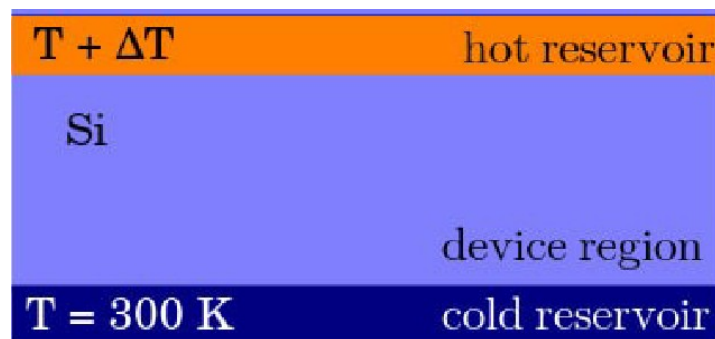


Рисунок 2.3 — Область моделювання кремнієвої плівки [54]

Розміри термостатів уздовж вертикальної вісі для плівки товщиною 1 нм обрані вдвічі меншими. Гарячим та холодним термостатом виступають термостати Ланжевена з температури T_0 та $T_0 + \Delta T$. Ці термостати моделюють теплообмін між системою та зовнішнім тепловим резервуаром, коригуючи температуру системи. На відміну від команди `fix nvt`, що була застосована раніше, `fix langevin` не виконує інтеграцію часу. Він лише змінює сили для здійснення термостатування.

Тому необхідно використовувати `fix nve`, щоб фактично оновити швидкості та положення атомів за допомогою модифікованих сил. Таким чином виконується часова інтеграція рівнянь руху для системи в ізольованому ансамблі. Вона зберігає кількість частинок N , об'єм V і енергію E системи. Це означає, що система розвивається без впливу на її енергію ззовні, і всі зміни в енергії є результатом взаємодії між атомами. Температурний профіль системи записується протягом 60000 часових кроків.

Після чого ефективна теплопровідність обчислюється як (21):

$$k = \frac{J \Delta z}{\Delta T} \quad (21)$$

Де Δz — товщина модельованої плівки;

ΔT — різниця температур між кінцями досліджуваної плівки, визначена з температурного профілю;

$J = \frac{|Q_{cold}| + |Q_{hot}|}{2S \Delta t}$ — тепловий потік, що проходить через плівку площею S за час Δt та визначається енергією Q_{hot} , яку передав гарячий термостат та енергією Q_{cold} , яку забрав холодний термостат.

2.3 Моделювання теплопровідності перпендикулярно до площини тонких плівок германію

Темплопровідність “cross-plane” нанорозмірних плівок германію товщиною 1 нм, 3 нм, 5 нм, 7 нм, 10 нм та 20 нм була змодельована методом нерівноважної молекулярної динаміки із застосуванням термостатів Ланжевена в програмному забезпеченні LAMMPS. Структура дослідженої плівки представлена на рис. 2.4.

Початкова конфігурація системи створювалася шляхом розташування атомів у відповідно до кристалічної решітки германію, який теж має алмазоподібну кубічну кристалічну структуру. Кожен атом Ge у вузлі решітки оточений чотирма сусідніми атомами Ge у тетраедричній координації.

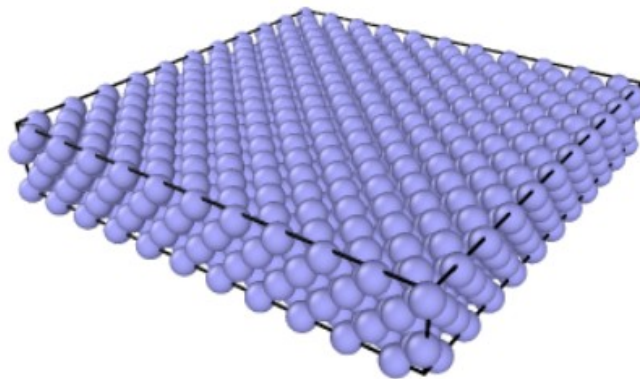


Рисунок 2.4 — Структура досліджуваної плівки германію [56]

Параметри ґратки складають приблизно 5.66 Å, а обрані кристалографічні орієнтації – [100] вздовж вісі Ох, [010] — вздовж вісі Оу та [001] вздовж вісі Oz. Періодичні граничні умови накладені в напрямках х та у, а вільні граничні умови – в напрямку z.

З закону Больцмана (1) довжина вільного пробігу фононів у об'ємному зразку германію становить 23 нм. Визначимо довжину вільного пробігу фононів у об'ємному зразку германію з рівняння Фукса-Зондгаймера з урахуванням того, що товщина плівки менша за довжину вільного пробігу фононів в об'ємному матеріалі, або дорівнює їй. Для плівки товщиною 1 нм: $\Lambda = \frac{3}{4} L \ln\left(\frac{\Lambda_b}{L}\right) = \frac{3}{4} \ln(23) \approx 2.4 \text{ нм}$. Максимальне значення довжини вільного пробігу для плівок обраних товщин становить 6 нм, тому для мінімізації розмірних було вирішено моделювати плівки довжиною 60 нм та шириною 60 нм для мінімізації розмірного ефекту.

Міжатомні взаємодії Ge-Ge описуються потенціалом Терсоффа (13 — 20), параметри якого наведені в таблиці 3 .

Таблиця 3 — Параметризація міжатомної взаємодії Ge-Ge [56]

Параметр	Розмірність	Значення
m	—	3
γ	—	1
λ_3	1/Å	0.0
c	—	$1.0643 \cdot 10^5$
d	—	15.652

*Продовження Таблиці 3 — Параметризація міжатомної
взаємодії Ge-Ge [56]*

B	eV	419.23
R	Å	2.95
D	Å	0.15
λ_1	1/Å	2.4451
A	eV	1769
β	—	$9.0166 \cdot 10^{-7}$
λ_2	1/Å	1.7047
$\cos \theta_0$	—	-0.43884
n	—	0.75627

Після накладання потенціалів міжатомної взаємодії моделюється мінімізація енергії системи з наступними параметрами: поріг зміни енергії — 10^{-4} , граничне значення сили — 10^{-6} eV/Å, максимально допустима кількість ітерацій алгоритму мінімізації — 100, максимальна кількість обчислень сили або енергії перед примусовою зупинкою алгоритму — 1000.

Область моделювання вздовж напрямку z також поділена на 3 області: холодний та гарячий резервуари товщиною 0.5 — 1 елементарна комірка залежно від товщини зразка і робоча зона між ними. Було визначено, що оптимальний часовий крок для моделювання ефективної теплопровідності всіх перелічених плівок германію становить 1 фс.

Модельована система релаксує та приходить до стану рівноваги за 30 пс в канонічному ансамблі (NVT) за температури T_0 , що відповідає температурі холодного резервуару, при цьому, використовується генератор випадкових чисел, який генерує ансамбль швидкостей при заданій температурі. Після чого на систему накладаються термостати Ланжевена з температурами T_0 – холодний резервуар та $T_0 + \Delta T$ – гарячий резервуар у визначених на рис. 2 позиціях. Температурний профіль системи записується протягом 60000 часових кроків. Ефективна теплопровідність також обраховується за формулою (21).

2.4 Моделювання площинної теплопровідності MoS_2

Для дослідження теплопровідності моношарового MoS_2 були обрані такі методи: РМД — залежність від довжини листа, ширини листа та НМД — залежність від довжини листа, ширини листа, температури.

Молібден(IV) сульфід (MoS_2) має шарувату гексагональну структуру. Елементарна комірка складається з одного атома молібдену, розташованого між двома шарами атомів сірки. Параметри ґратки становлять $a=b=3.16 \text{ \AA}$, $c=12.3 \text{ \AA}$. Початкова конфігурація системи створювалася шляхом розташування атомів у визначених частинах простору відповідно до кристалічної решітки досліджуваного моношару (рисунок 2.5).

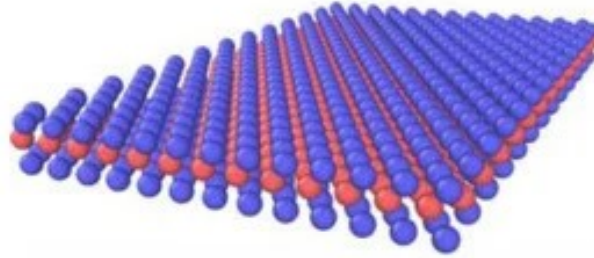


Рисунок 2.5 — Дисульфід молібдена. Візуалізація в OVITO

Відомо, що довжина вільного пробігу фононів в моношаровому MoS_2 менше 20 нм [53], а геометричні розміри досліджуваних моношарів є більшими за наведене значення (довжина 40 - 200 нм, ширина 30 - 70 нм).

Для опису міжатомних взаємодій був обраний потенціал Штіллінгера-Вебера, який моделює ковалентні міжатомні взаємодії в кристалічній структурі MoS_2 , використовуючи 2-тілесні та 3-тілесні члени, які імітують енергетичні профілі для взаємодій розтягування та згинання зв'язків (тобто спотворення кута зв'язку). Повна потенціальна енергія даної системи з N атомів, може бути записана як (22—23):

$$E(r_1, \dots, r_N) = \sum_{i < j} V_2(r_{ij}) + \sum_{i < j < k} V_3(r_{ij}, r_{jk}, \theta_{ijk}) \quad (22)$$

$$\begin{aligned} r_{ij} &= |\vec{r}_j - \vec{r}_i| \\ V_2(r_{ij}) &= A \epsilon_{ij} B_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{p_{ij}} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{q_{ij}} \right] \exp\left(-\frac{\gamma}{r_{ij} - r_{cut}}\right) \\ V_3(r_{ij}, r_{jk}, \theta_{ijk}) &= \lambda \exp\left(\frac{\gamma_1}{r_{ij} - r_1} - \frac{\gamma_2}{r_{ij} - r_2}\right) (\cos \theta - \cos \theta_0) \end{aligned} \quad (23)$$

Де λ , γ_1 і γ_2 — оптимізаційні параметри. Характерна експоненціальна залежність міжатомних енергій і явно визначена відстань відсікання для міжатомних взаємодій робить силове поле короткодійним і локальним, що полегшує чисельну реалізацію для великомасштабних симуляцій МД.

Параметри для обраного потенціалу були завантажені з бази даних OpenKIM, вони наведені в таблиці 4.

Таблиця 4 — Параметризація міжатомної взаємодії $Mo - S$ та $S - S$ для потенціала Штіллінгера-Вебера

Параметр	Розмірність	Значення
ϵ	eV	1
γ	—	1
λ	—	67.883
σ	Å	1.252
$\cos \theta_0$	—	0.143
B	—	7.223
q	—	0
p	—	4
A	—	6.918

Область моделювання вздовж напрямку z поділена на 3 області рис. 2.6: холодний резервуар, робоча зона, товщина якої залежить від товщини

модельованого зразка та гарячий резервуар. Помаранчевою стрілкою позначений напрямок теплового потоку.

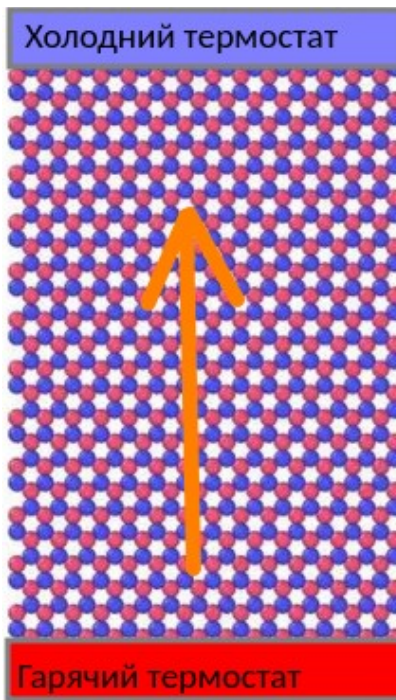


Рисунок 2.6 — Схема області моделювання

Гарячим та холодним термостатом виступають термостати Ланжевена з температури T_0 та $T_0 + \Delta T$. Ці термостати моделюють теплообмін між системою та зовнішнім тепловим резервуаром, коригуючи температуру системи. На відміну від команди `fix nvt`, що була застосована раніше, `fix langevin` не виконує інтеграцію часу. Він лише змінює сили для здійснення термостатування. Тому необхідно використовувати `fix nve`, щоб фактично оновити швидкості та положення атомів за допомогою модифікованих сил. Таким чином виконується часова інтеграція рівнянь руху для системи в ізольованому ансамблі. Вона зберігає кількість частинок N , об'єм V і енергію E системи.

Це означає, що система розвивається без впливу на її енергію ззовні, і всі зміни в енергії є результатом взаємодії між атомами. Температурний профіль системи записується протягом 60000 часових кроків.

Після чого ефективна теплопровідність обчислюється як (24):

$$k = \frac{J \Delta z}{\Delta T} \quad (24)$$

Де Δz — товщина модельованої плівки;

ΔT — різниця температур між кінцями досліджуваної плівки, визначена з температурного профілю;

$J = \frac{|Q_{cold}| + |Q_{hot}|}{2 S \Delta t}$ — тепловий потік, що проходить через плівку площею S за час Δt та визначається енергією Q_{hot} , яку передав гарячий термостат та енергією Q_{cold} , яку забрав холодний термостат.

Методом РМД було обчислено автокореляційну функцію теплового потоку для системи. Для цього було обчислено кінетичну енергію, потенціальну енергію, стрес для кожного атома і на основі отриманих даних обраховано тепловий потік. За допомогою отриманих значень теплового потоку були визначені компоненти теплового потоку вздовж осей x , y , z . Після чого була встановлена умовна інтеграція за методом Нейвтона-Верле та обчислені кореляції теплового потоку за допомогою методу Гріна-Кубо та проінтегровані значення теплового потоку по напрямку. Обчислення проводилися за температури 300 К.

2.5 Моделювання площинної теплопровідності метадисульфиду молібдена залежно від радіуса пор

Для дослідження метадисульфиду молібдену у досліджених раніше листах MoS_2 розмірами 200×200 нм були створені регулярні круглі отвори різних радіусів (20 — 80 нм), що репрезентує різну частку пор у досліджуваному матеріалі (рис.2.7).

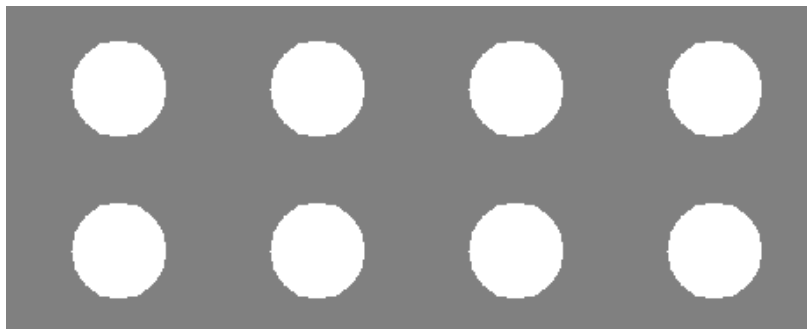


Рисунок 2.7 — Схематичне зображення метаматеріалу з періодичними порами

Регулярність отворів у двовимірному матеріалі впливає на розсіювання фононів (розсіювання на дефектах / фонон-межове розсіювання). З урахуванням того, що на систему накладені періодичні граничні умови, змодельовано було лист з однією порою в ньому, що репрезентативно довгому листу з N періодично розташованих пор.

2.6 Моделювання площинної теплопровідності метананоплівки кремнію залежно від радіуса пор

Для дослідження теплопровідності метананоплівки кремнію залежно від параметрів пор було використано метод НМД. У наноплівці товщиною 3 нм та розмірами 150*150 нм були створені регулярні круглі отвори шляхом видалення атомів в певних геометричних межах системи відповідно до радіусів (10 — 60 нм).

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

3.1 Теплопровідність наноплівки кремнію

Відомо, що кремній — напівпровідник, тому основними носіями теплової енергії в ньому мають бути фонони. Визначимо ефективну теплопровідність кремнієвих наноплівок залежно від їх товщини (рисунок 3.1).

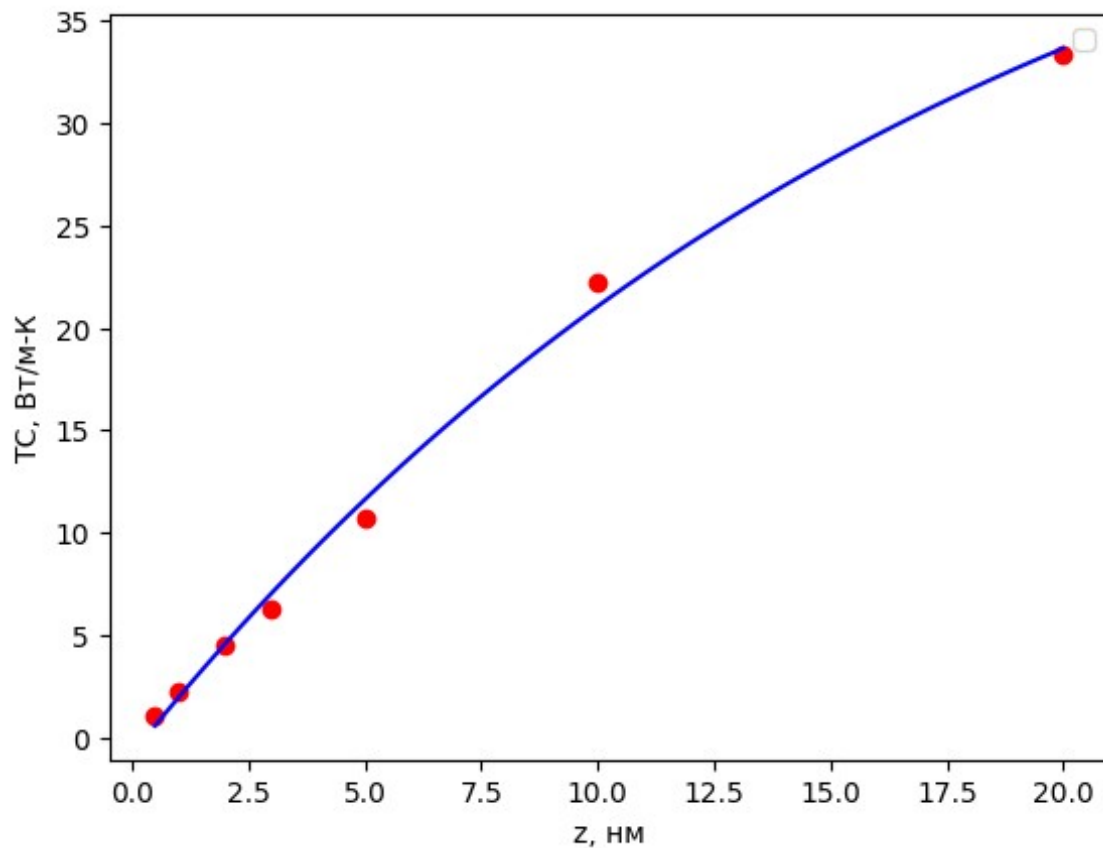


Рисунок 3.1 — Залежність ефективної теплопровідності кремнієвої наноплівки від товщини плівки

Видно, що ефективна теплопровідність кремнієвих наноплівки зростає зі збільшенням їх товщини від $1.1 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$ при 0.5 нм до $33.3 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$ при 20 нм (рис.8).

Отримана залежність може бути описана виразом $\kappa_{eff} = (50.73 \pm 6.61) - (51.53 \pm 6.31) e^{(-0.06 \pm .001) z}$.

Оцінимо значення теплопровідності об'ємного матеріалу шляхом визначення κ_{eff} при $\frac{1}{z} \rightarrow 0$. Для цього апроксимуємо залежність $\frac{1}{\kappa}(\frac{1}{z})$ прямою (рис.3.2), що задається рівнянням: $\frac{1}{\kappa_{eff}} = \frac{0.4308 \pm 0.0031}{z} + (0.0081 \pm 0.0027)$.

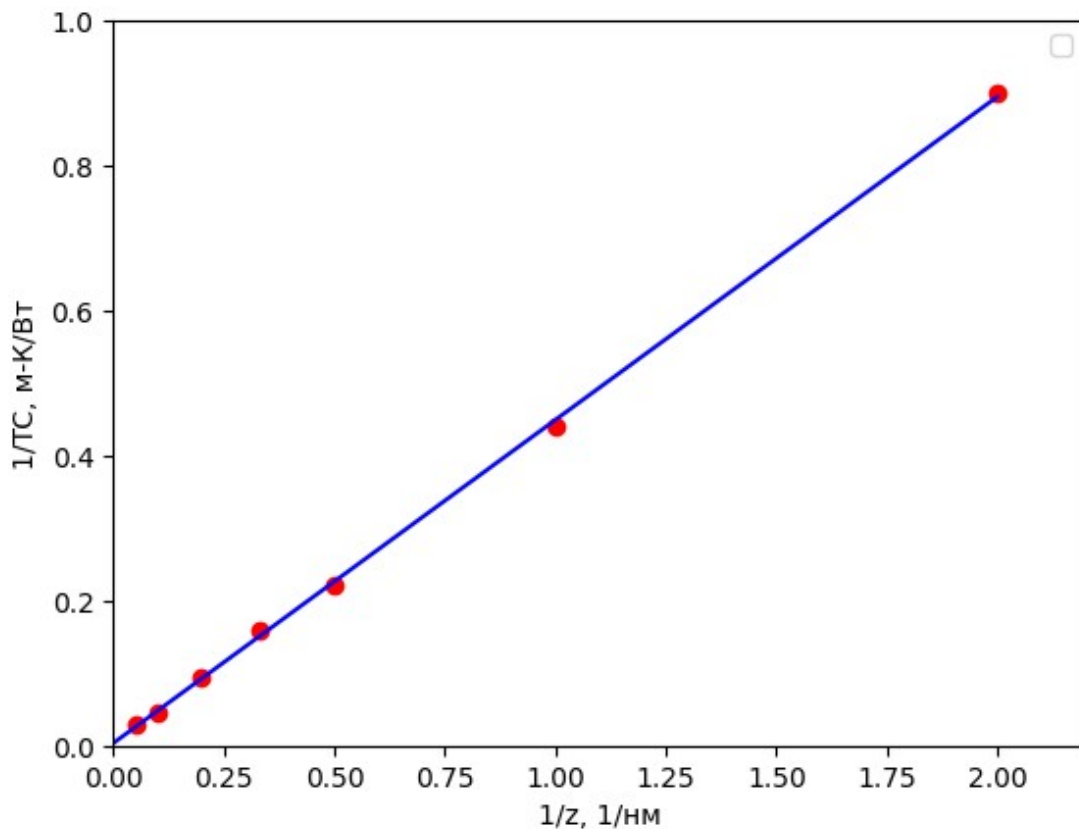


Рисунок 3.2 — Залежність оберненої теплопровідності кремнієвої наноплівки залежно від оберненої товщини плівки

Звідки $\kappa_{eff} = \frac{1}{0.074} = 123.5 \frac{Вт}{м \cdot К}$, що становить 83% від табличного значення теплопровідності кремнію.

Дослідимо залежність ефективної теплопровідності кремнієвої наноплівки товщиною 3 нм від температури. Отримана залежність представлена на рис. 3.3.

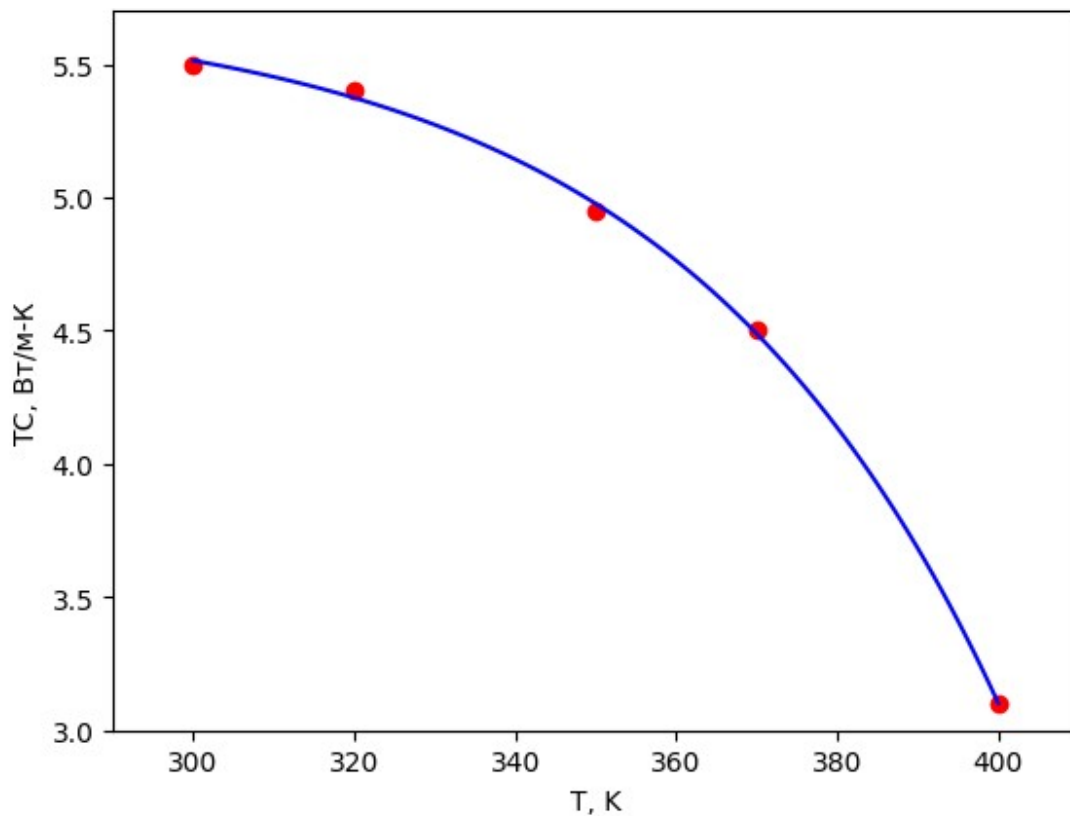


Рисунок 3.3 — Залежність ефективної теплопровідності кремнієвої наноплівки товщиною 3 нм від температури

Видно, що зі збільшенням температури ефективна теплопровідність досліджуваного зразка падає від 5.5 Вт/м-К до 3.1 Вт/м-К, причому отримана

залежність може бути описана наступним виразом:

$$\kappa_{eff} = (5.73 \pm 0.05) - (1.19 \cdot 10^{-4} + 0.63 \cdot 10^{-4}) \exp((2.51 \cdot 10^{-2} \pm 0.12 \cdot 10^{-2}) T).$$

Визначимо значення електронної теплопровідності кремнію за законом Відемана-Франца для об'ємного матеріалу (25):

$$\kappa = L \sigma T \quad (25)$$

де L — число Лоренца, яке становить $L = \frac{\pi}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2$ для легованого матеріалу та

$$L = (r + 2.5) \left(\frac{k_B}{e} \right)^2, r = const \text{ для нелегованого матеріалу};$$

$\sigma = N_D \mu_e e$ — електропровідність;

N_D — концентрація донорних домішок;

μ_e — рухливість електронів.

У випадку легованого об'ємного кремнію рухливість електронів становить $\sim 10^3$, число Лоренца $\sim 10^{-8}$. Тоді при концентрації донорних домішок порядку 10^{16} за температур 300 — 400 К електронна теплопровідність буде $\sim 10^{-4}$. У випадку нелегованого об'ємного кремнію за тих самих умов при концентрації донорної домішки порядку 10^6 електронна теплопровідність становитиме $\sim 10^{-13}$. При цьому фононна теплопровідність кремнію — порядку 10^2 , що в 10^6 — 10^{15} разів більше. На наномасштабі число Лоренца може відрізнятися від значень для об'ємного матеріалу, але в порівнянні з співвідношенням електронної та фононної

теплопровідностей ця відмінність є нехтовно малою. Таким чином, як і очікувалося, в кремнії основними носіями тепла є фонони.

3.2 Теплопровідність германієвих наноплівкок

Було досліджено залежність ефективної теплопровідності германієвої наноплівки від температури в діапазоні 300 — 400 К. Отримана залежність представлена на рис. 3.4.

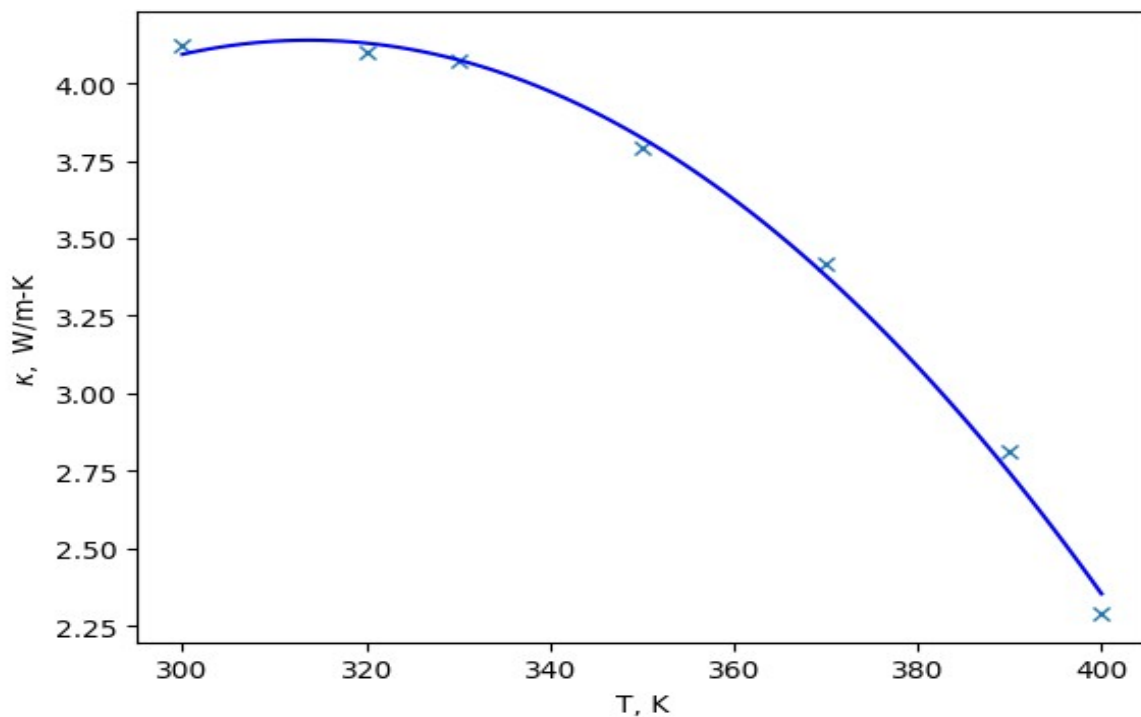


Рисунок 3.4 — Залежність ефективної теплопровідності наноплівки германію товщиною 3 нм від температури [56]

Видно, що зі збільшенням температури ефективна теплопровідність досліджуваної наноплівки стрімко спадає від $4.12 \frac{Bm}{m \cdot K}$ до $2.29 \frac{Bm}{m \cdot K}$ за квадратичним законом: $k_{eff} = (-24 \cdot 10^{-5} \pm 0.007) T^2 + (15.1 \pm 0.6) \cdot 10^{-2} T + (19.5 \pm 0.6)$.

На рис. 3.5 наведено отриману залежність ефективної теплопровідності від товщини германієвої наноплівки. Видно, що теплопровідність зростає зі збільшенням товщини плівки від $1.26 \frac{Bm}{m \cdot K}$ до $17.02 \frac{Bm}{m \cdot K}$ за законом $\kappa_{eff} = (24.79 \pm 4.85) - (25.73 \pm 4.19) \cdot e^{-(0.06 \pm 0.02) \cdot z}$.

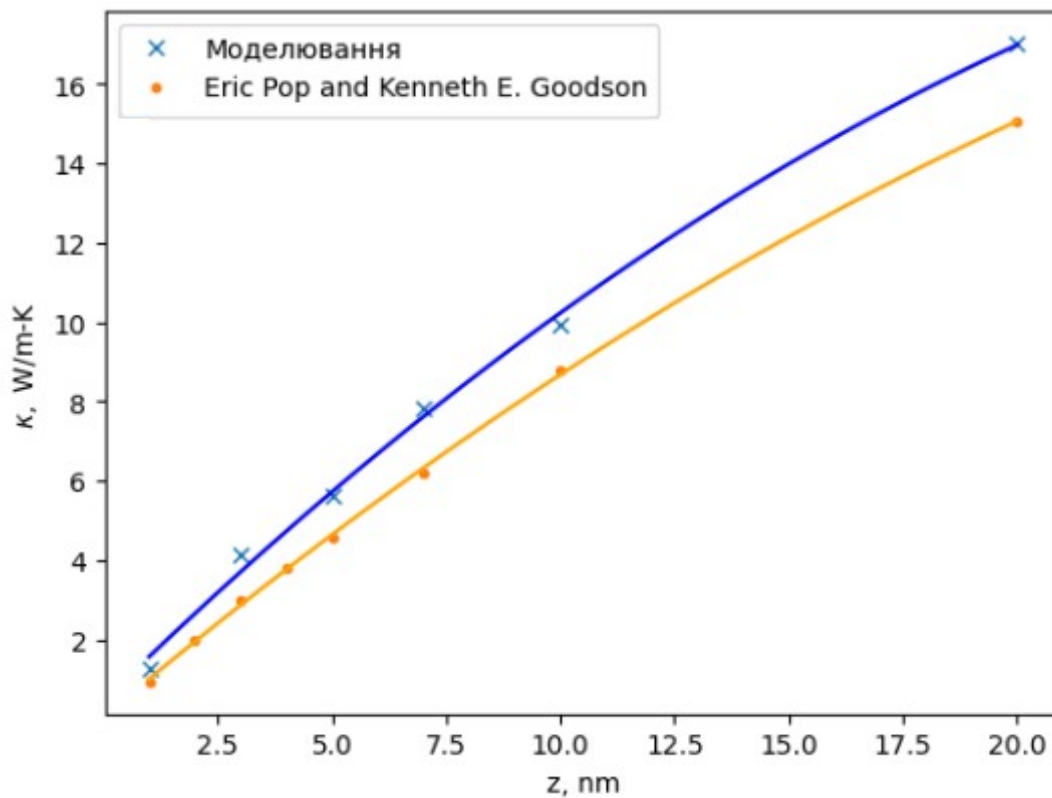


Рисунок 3.5 — Залежність ефективної теплопровідності германієвої наноплівки від її товщини [56]

Схожа тенденція спостерігається в дослідженні [61] (див рис. 12).

Отримані результати в межах 13% узгоджуються із результатами [61]. Як і очікувалося, теплопровідність нанорозмірної плівки значно менша за теплопровідність об'ємного матеріалу – 10.6% від k_{bulk} . Оцінити ефективну теплопровідність об'ємного матеріалу на основі результатів, отриманих для нанорозмірних плівок можна із залежності оберненої ефективної теплопровідності від оберненої товщини плівки при $1/z \rightarrow 0$ (рис.3.6) [62].

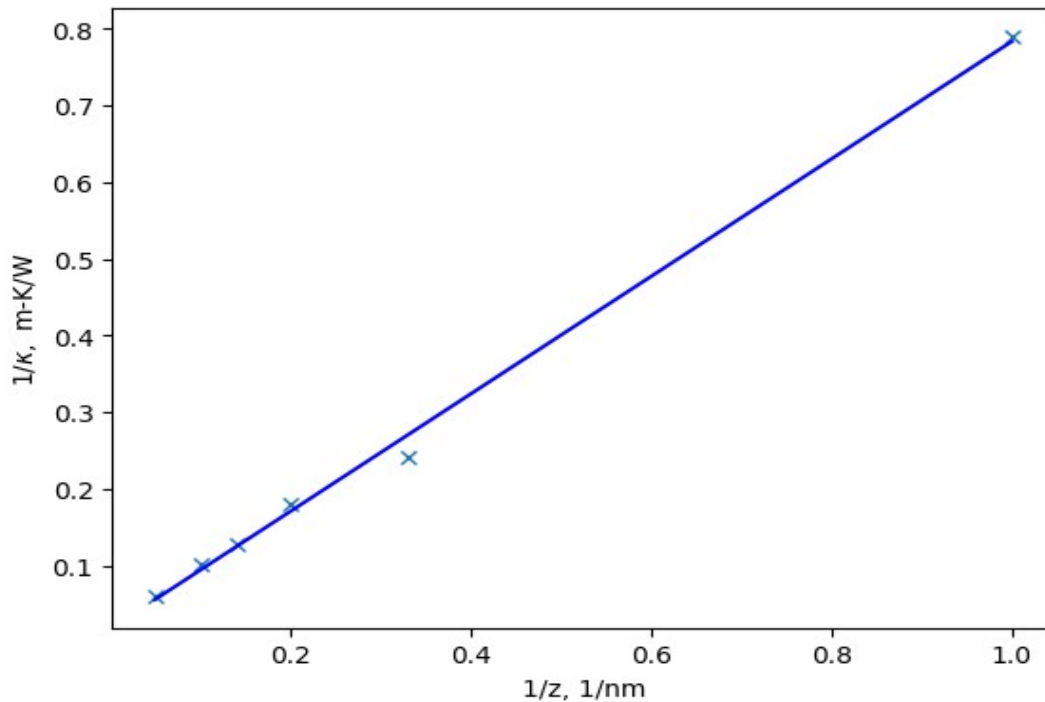


Рисунок 3.6 — Оцінка ефективної теплопровідності об'ємного германію на основі моделювання МД [56]

Отримана залежність може бути апроксимована виразом $\frac{1}{k_{eff}} = \frac{0.766}{z} + 0.021$.

Таким чином, ефективна теплопровідність об'ємного германію на основі

отриманих результатів моделювання ефективної теплопровідності нанорозмірних германієвих плівок становить $\kappa_{eff} = \frac{1}{0.021} = 47.6 \frac{Bm}{m \cdot K}$. Однак відомо, що теплопровідність об'ємного германію становить порядку $60 \frac{Bm}{m \cdot K}$, відтак, отримана фононна теплопровідність становить $\sim 79.5\%$ від табличного значення. Тому необхідно оцінити вклад електронів у теплопровідність досліджуваного металоїда за законом Відемана-Франца (25). У досліджуваному матеріалі вважатимемо, що $L \sim 10^{-8}$, $\mu_e \sim 10^3$, тоді при концентрації донорної домішки порядку 10^{16} за зазначеного вище діапазону температур електронна теплопровідність буде порядку 10^{-3} , а при концентрації донорної домішки порядку 10^6 — порядку 10^{-12} , тоді як фононна складова теплопровідності — порядку десятків. Таким чином, у розглянутому випадку домінує фононна теплопровідність, а отже, фонони є домінуючими носіями тепла в германії. Відомо, що в наномасштабі число Лоренца відрізняється від об'ємного значення, але ця відмінність має набагато менший порядок ніж співвідношення електронної та фононної теплопровідностей, тому впливом електронів можна знехтувати в германієвих наноплівках. Слід зазначити, що було розглянуто ідеалізований випадок як для германієвих так і для кремнієвих наноплівок й теплопровідність наноплівок також може залежати від кристалічної орієнтації, наявності дефектів чи домішок тощо.

3.3 Теплопровідність MoS₂

Розглянемо теплові властивості 2D матеріалу — моношарового дисульфіду молібдена. Для вибору оптимального методу моделювання моношару було проведено моделювання теплопровідності SLMoS₂ при фіксованій ширині листа

40 нм за температури 300 К залежно від довжини листа (рис.3.7). Зі зменшенням довжини листа теплопровідність моношарового дисульфіда молібдена спадає від 47.5 Вт/м-К до 31.1 Вт/м-К за результатами моделювання методом НМД та від 46.2 Вт/м-К до 30.1 Вт/м-К за результатами РМД симуляції.

Відмінність в тривалості моделювання становить 39.5 хвилин для зразка 40*40 нм. Метод НМД виявився обчислювально менш затратним.

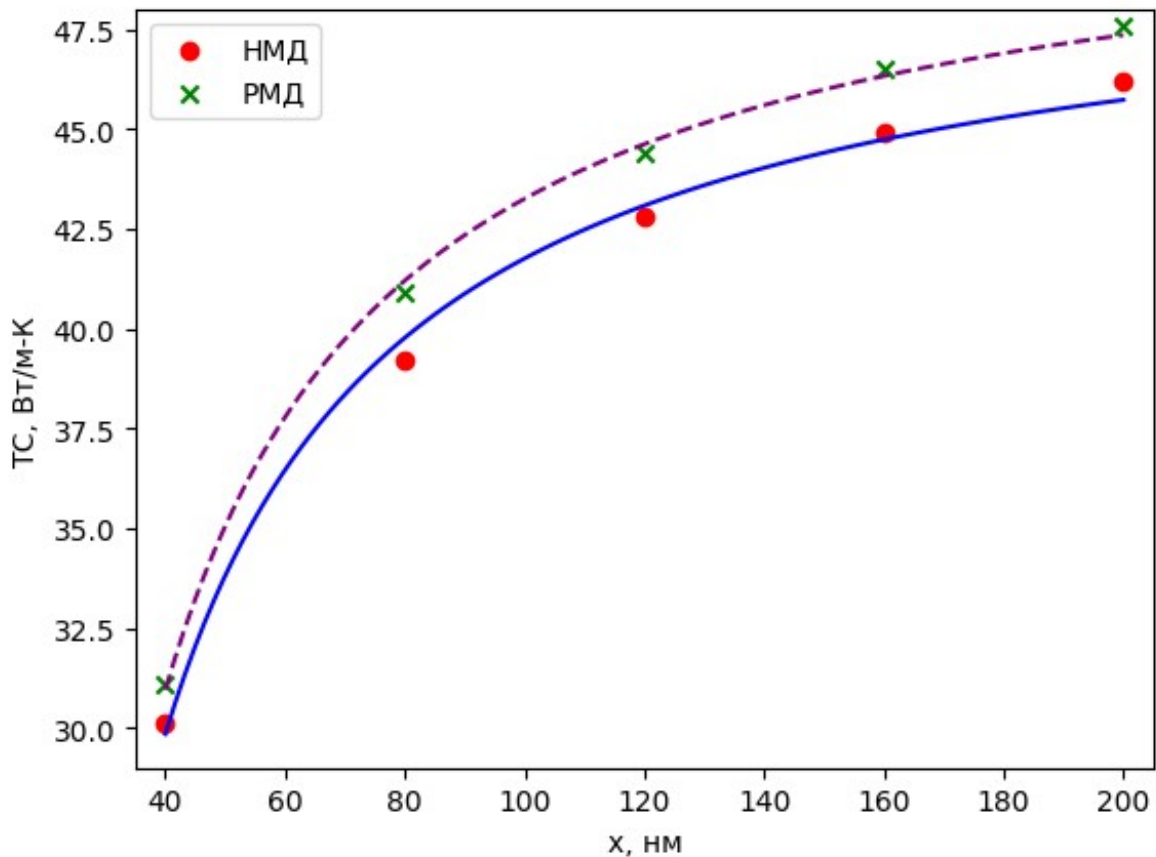


Рисунок 3.7 — Залежність ефективної теплопровідності моношарового дисульфіда молібдена від довжини листа при ширині листа 40 нм

Відомо, що залежність часу моделювання від розмірів системи є нелінійною, оскільки у загальному випадку, час, необхідний для кожного кроку симуляції, буде залежати від кількості атомів і їхніх сусідів (що визначається через параметри потенціалу та структуру матеріалу), крім того, обраний потенціал забезпечує обчислення взаємодій для трійок атомів, що вимагає додаткових обчислювальних витрат на кожен атом. Відомо, що при апроксимації $1/k(1/x)$ лінійною залежністю (рис.3.8) буде отримане значення оберненої теплопровідності “об’ємного” матеріалу при $x=0$ (оскільки в цьому випадку $1/x$ прямуватиме до нескінченності).

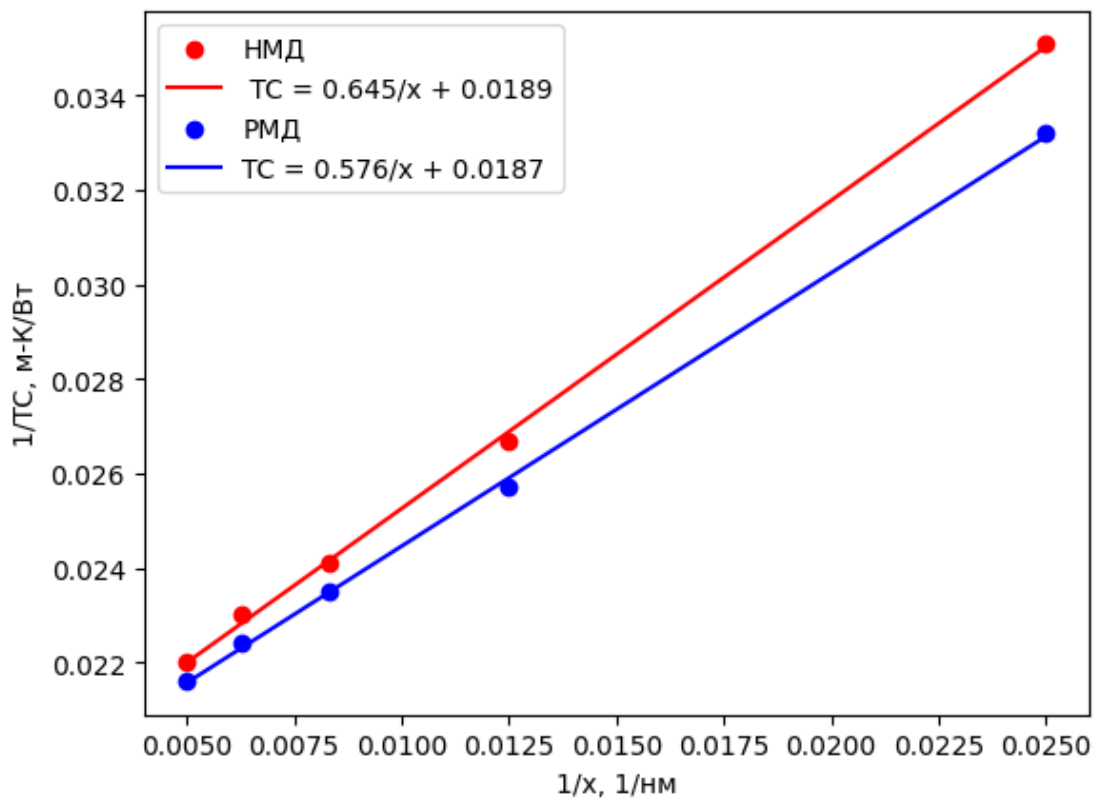


Рисунок 3.8 — Залежність оберненої теплопровідності від оберненої довжини листа MoS_2 при фіксованій ширині листа 40 нм

Таким чином, з методу рівноважної молекулярної динаміки отримано:

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{0.0187} = 53.5 \frac{W}{m \cdot K}, \text{ а з методу нерівноважної молекулярної динаміки —}$$

$$\kappa_{eff} = \frac{1}{0.0189} = 52.9 \frac{W}{m \cdot K}.$$

Таким чином, відмінність між отриманими результатами становить порядка 1% і з урахуванням того, що метод НМД виявився менш обчислювально затратним всі подальші моделювання будуть базуватися саме на НМД. Залежність теплопровідності від ширини листа при фіксованій довжині листа — 200 нм зображена на рис.3.9.

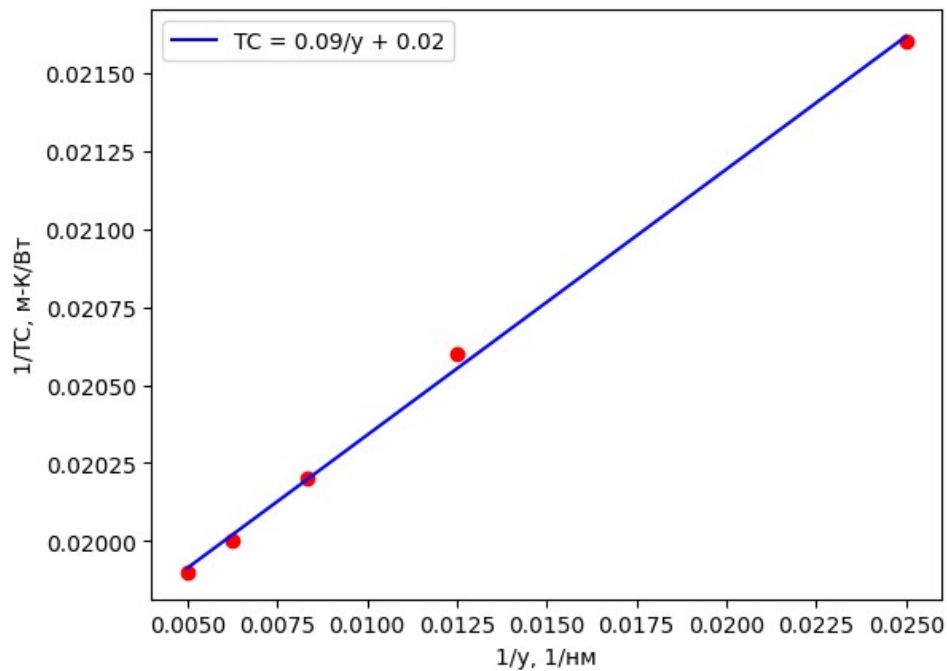


Рисунок 3.9 — Залежність оберненої теплопровідності від оберненої ширини листа MoS2 при фіксованій довжині листа 200 нм

З отриманих результатів $\kappa_{eff} = \frac{1}{0.0195} = 51.3 \frac{W}{m \cdot K}$, що є тотожним відомим з літературних джерел значенням [48]. Для дослідження теплопровідності моношару

MoS₂ у [48] був застосований метод нерівноважної молекулярної динаміки і передбачене значення об'ємного MoS₂ становить 51.4 Вт/м·К. Таким чином, отримані результати близькі до вже відомих і відхилення становить 1-3% для НМД та 4% для РМД.

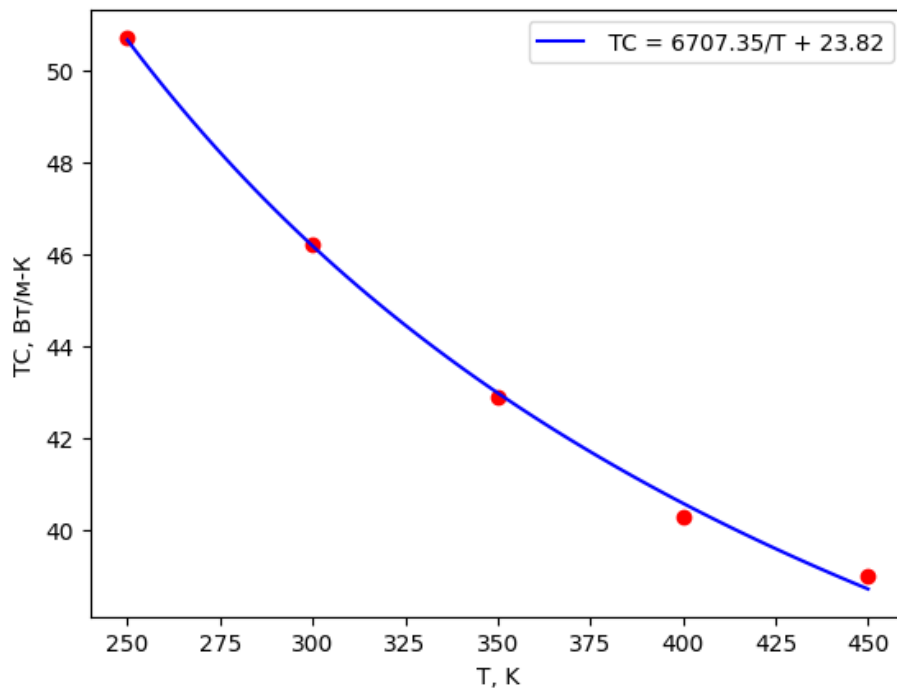


Рисунок 3.10 — Залежність теплопровідності моношарового дисульфиду молібдена від температури

Для визначення залежності теплопровідності від температури були проведені моделювання методом НМД за температур 250 К — 450 К з кроком 50 К. Отримані результати представлені на рис.3.10. Видно, що зі збільшенням температури теплопровідність спадає. Отримана залежність може бути апроксимована рівнянням: $\kappa_{eff} = \frac{6707.35}{T} + 23.82$, де T — температура.

3.4 Теплопровідність метаматеріалів

Результати моделювання залежності ефективної теплопровідності моношарового метадисульфиду молібдена від радіуса періодичних пор круглої форми в досліджуваному зразку наведені на рис.3.11.

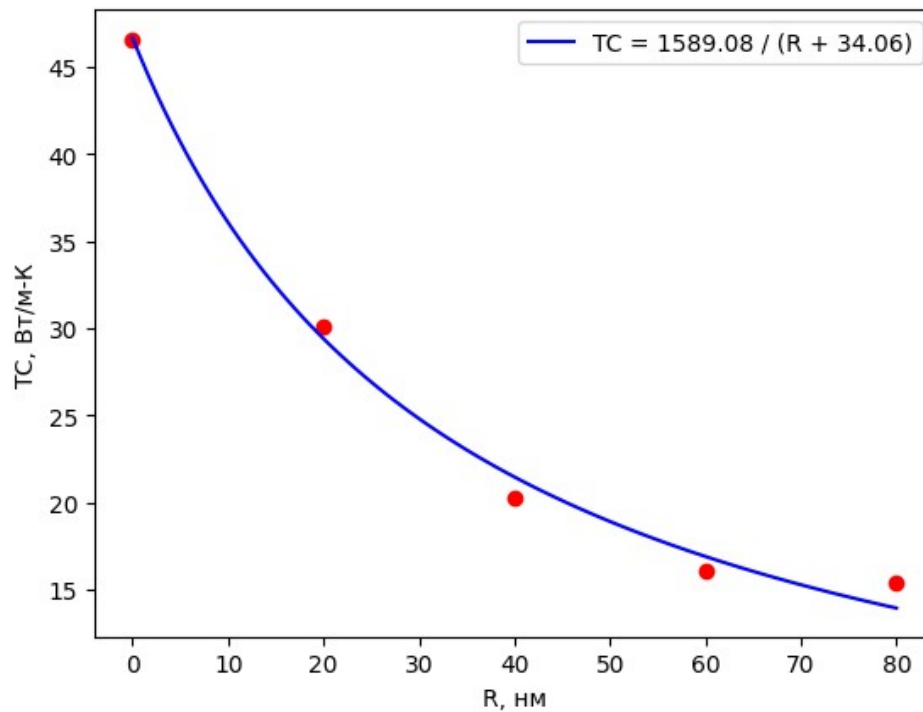


Рисунок 3.11 — Залежність теплопровідності метадисульфиду молібдена від радіуса періодичних круглих отворів в ньому

Отримана залежність може бути апроксимована рівнянням: $\kappa_{eff} = \frac{1589.08}{R+34.06}$, де R — радіус пори. Як і очікувалося, теплопровідність досліджуваного матеріалу спадає при збільшенні радіусу пор, що можна пояснити тим, що більша частка

фононів розсіюється і в даному випадку домінує фонон-межове розсіювання та розсіювання на дефектах (залежно від розміру пори).

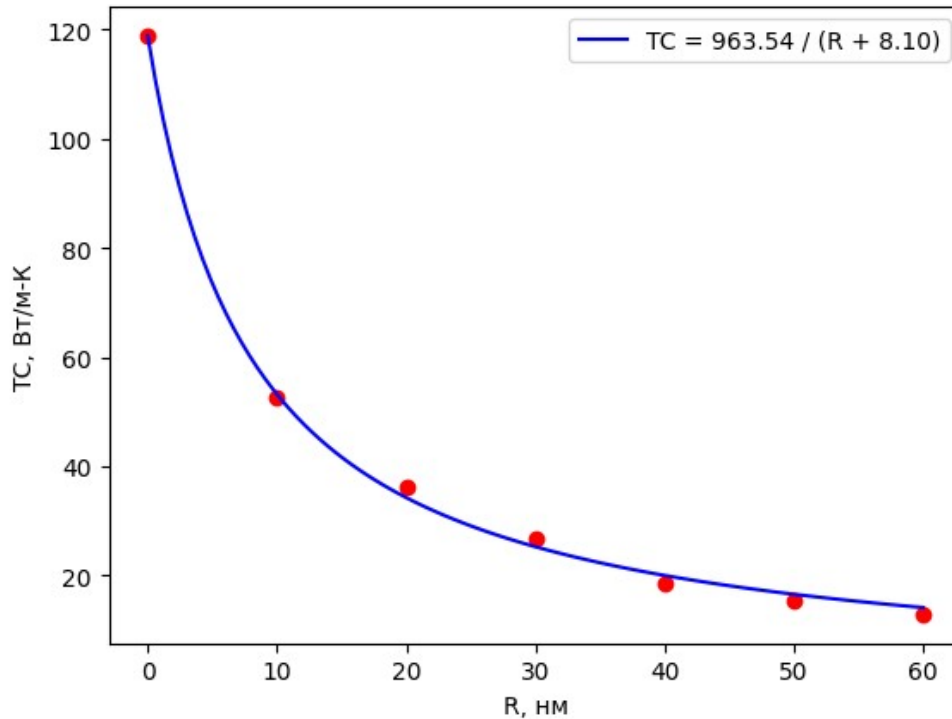


Рисунок 3.12 — Залежність теплопровідності метананоплівки кремнію від радіуса періодичних пор в ній

На рисунку 3.12 представлена залежність теплопровідності метананоплівки кремнію від радіусу пор, що були в ньому створені. Як і очікувалося, аналогічно до метадисульфиду молібдена, спостерігається спадна гіперболічна залежність, яку можна представити наступним чином: $\kappa_{eff} = \frac{963.54}{R + 8.1}$.

ВИСНОВКИ

Було проведено моделювання ефективної теплопровідності наноплівки кремнію, германію та моношарового дисульфиду молібдену (MoS_2) залежно від їх товщини, температури та структурних особливостей.

1. Було порівняно результати двох методів молекулярної динаміки: нерівноважна молекулярна динаміка виявилася на 40% менш обчислювально затратною в порівнянні з рівноважною, відмінність між отриманими значеннями теплопровідності становить $\sim 1\%$.
2. Ефективна теплопровідність в напрямку товщини кремнієвих та германієвих наноплівки товщиною 3 нм спадає зі зменшенням товщини плівки на 96% та 92% відповідно, площинна теплопровідність MoS_2 спадає на 35% зі зменшенням довжини листа, а зі зменшенням ширини листа — на 21%.
3. Оцінене з екстраполяції значення теплопровідності об'ємного кремнію складає 83%, а об'ємного германію — 79.5% від табличного значення.
4. Ефективна теплопровідність кремнієвої наноплівки в напрямку товщини спадає на 43%, а германієвої — на 45% при зростанні температури від 300 К до 400 К, а ефективна теплопровідність моношарового дисульфиду молібдена в напрямку площини — на 27% зі збільшенням температури від 250 К до 450 К.
5. Встановлено, що площинна теплопровідність матеріалів із регулярними порами спадає за гіперболічним законом із ростом

радіусу на 66% для MoS_2 і на 85% для кремнієвої метананоплівки при наявності пор радіуса 60 нм в порівнянні з ідеальною наноплівкою.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Yoon, G. H., Dede, E. M., Nomura, T., and Schmalenberg, P., 2020, “ Topology Optimization of Time-Transient Heat Conduction for Thermo-Optic Silicon Modulators,” Int. J. Heat Mass Transfer, 157C, p. 119862.
2. <https://www.mdpi.com/2072-666X/14/11/2045>
3. Koyanagi M., Fukushima T., Tanaka T. High-Density Through Silicon Vias for 3-D LSIs. Proceedings of the IEEE. 2009. Vol. 97, no. 1. P. 49–59. URL: <https://doi.org/10.1109/jproc.2008.2007463>
4. Ren, Z., Alqahtani, A., Bagherzadeh, N., and Lee, J., 2020, “ Thermal TSV Optimization and Hierarchical Floorplanning for 3D Integrated Circuits,” IEEE Trans. Compon., Packag. Manuf. Technol., 10 (4), pp. 599–610. [10.1109/TCPMT.2020.2970382](https://doi.org/10.1109/TCPMT.2020.2970382)
5. Li, D., Wu, Y.Y., Kim, P., Shi, L., Yang, P.D., Majumdar, A.: Thermal Conductivity of Individual Silicon Nanowires. Applied Physics Letters 83, 2934–2936 (2003)
6. Rowe, D.M. (ed.): Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano. CRC Press, Boca Raton (2005)
7. Sondheimer, E.H.: The Mean Free Path of Electrons in Metals. Advances in Physics 1, 1–42 (1952)
8. Majumdar, A.: Microscale Heat-Conduction in Dielectric Thin-Films. Journal of Heat Transfer 115, 7–16 (1993)
9. A Review of Simulation Methods in Micro/Nanoscale Heat Conduction / H. Bao et al. ES Energy & Environment. 2018. URL: <https://doi.org/10.30919/esee8c149>
10. T. Beechem, S. Graham, P. Hopkins, and P. Norris, Appl. Phys. Lett. 90,054104 (2007).

11. A. B. Cohen, A. Kraus, and S. Davidson, "Thermal frontiers in the design and packaging of microelectronic equipment," *Mechanical Engineering*, vol. 105, no. 6, pp. 53–59, 1983.
12. L. Yeh, "Review of heat transfer technologies in electronic equipment," *Journal of Electronic Packaging*, ASME, vol. 117, pp. 333–339, 1995
13. Nanoscale Heat Transport Analysis by Scanning Thermal Microscopy: from calibration to High-Resolution Measurements / L. Vera et al. *Nanoscale Advances*. 2022. URL: <https://doi.org/10.1039/d2na00287f>
14. Luo T., Chen G. Nanoscale heat transfer – from computation to experiment. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2013. Vol. 15, no. 10. P. 3389. URL: <https://doi.org/10.1039/c2cp43771f>
15. Thermal effects on the characteristic Raman spectrum of molybdenum disulfide (MoS₂) of varying thicknesses / S. Najmaei et al. *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 100, no. 1. P. 013106. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3673907>
16. Measurement of the thermal conductivities of suspended MoS₂ and MoSe₂ by nanosecond ET-Raman without temperature calibration and laser absorption evaluation / R. Wang et al. *Nanoscale*. 2018. Vol. 10, no. 48. P. 23087–23102. URL: <https://doi.org/10.1039/c8nr05641b>
17. Zhang Z., Chen J. Thermal conductivity of nanowires. *Chinese Physics B*. 2018. Vol. 27, no. 3. P. 035101. URL: <https://doi.org/10.1088/1674-1056/27/3/035101>
18. Nikolopoulos L. A. A. Laser Pulses. *Computing Atomic Quantum Dynamics in Laser Fields*. 2022. P. 1–12. URL: https://doi.org/10.1063/9780735422575_005
19. Anisotropic Thermal Conductivity of Exfoliated Black Phosphorus / H. Jang et al. *Advanced Materials*. 2015. Vol. 27, no. 48. P. 8017–8022. URL: <https://doi.org/10.1002/adma.201503466>
20. Ziman, J.M.: ELECTRON-ELECTRON INTERACTION, in *Electrons and Phonons*, pp. 159–174. Oxford University Press, Oxford (2001)

21. Recent advances in lattice thermal conductivity calculation using machine-learning interatomic potentials / S. Arabha et al. *Journal of Applied Physics*. 2021. Vol. 130, no. 21. P. 210903. URL: <https://doi.org/10.1063/5.0069443>
22. Publisher's Note: Monte Carlo analysis for finite-temperature magnetism of Nd₂Fe₁₄B permanent magnet [Phys. Rev. B 94 , 174433 (2016)] / Y. Toga et al. *Physical Review B*. 2016. Vol. 94, no. 21. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.94.219901>
23. Mazumder S., Majumdar A. Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization. *Journal of Heat Transfer*. 2001. Vol. 123, no. 4. P. 749–759. URL: <https://doi.org/10.1115/1.1377018>
24. Monte Carlo simulation of phonon confinement in silicon nanostructures: Application to the determination of the thermal conductivity of silicon nanowires / D. Lacroix et al. *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 89, no. 10. P. 103104. URL: <https://doi.org/10.1063/1.2345598>
25. Chakraborty D., Foster S., Neophytou N. Monte Carlo phonon transport simulations in hierarchically disordered silicon nanostructures. *Physical Review B*. 2018. Vol. 98, no. 11. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.98.115435>
26. Ruoff R. S., Lorents D. C. Mechanical and thermal properties of carbon nanotubes. *Carbon*. 1995. Vol. 33, no. 7. P. 925–930. URL: [https://doi.org/10.1016/0008-6223\(95\)00021-5](https://doi.org/10.1016/0008-6223(95)00021-5)
27. A uniform source-and-sink scheme for calculating thermal conductivity by nonequilibrium molecular dynamics. *The Journal of Chemical Physics*. 2010. Vol. 133, no. 2. P. 024106. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3463699>
28. Müller-Plathe F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity. *The Journal of Chemical Physics*. 1997. Vol. 106, no. 14. P. 6082–6085. URL: <https://doi.org/10.1063/1.473271>

29. Force and heat current formulas for many-body potentials in molecular dynamics simulations with applications to thermal conductivity calculations / Z. Fan et al. *Physical Review B*. 2015. Vol. 92, no. 9. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.92.094301>
30. Volz S. G., Chen G. Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of silicon nanowires. *Applied Physics Letters*. 1999. Vol. 75, no. 14. P. 2056–2058. URL: <https://doi.org/10.1063/1.124914>
31. Ye Z., Cao B., Guo Z. High and anisotropic thermal conductivity of body-centered tetragonal C4 calculated using molecular dynamics. *Carbon*. 2014. Vol. 66. P. 567–575. URL: <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2013.09.039>
32. Carbogno C., Ramprasad R., Scheffler M. Ab Initio Green-Kubo Approach for the Thermal Conductivity of Solids. *Physical Review Letters*. 2017. Vol. 118, no. 17. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevlett.118.175901>
33. Chen J., Zhang G., Li B. How to improve the accuracy of equilibrium molecular dynamics for computation of thermal conductivity?. *Physics Letters A*. 2010. Vol. 374, no. 23. P. 2392–2396. URL: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2010.03.067>
34. Rotenberg B., Pagonabarraga I. Electrokinetics: insights from simulation on the microscopic scale. *Molecular Physics*. 2013. Vol. 111, no. 7. P. 827–842. URL: <https://doi.org/10.1080/00268976.2013.791731> (date of access: 22.03.2025).
35. Influence of thermostatting on nonequilibrium molecular dynamics simulations of heat conduction in solids / Z. Li et al. *The Journal of Chemical Physics*. 2019. Vol. 151, no. 23. P. 234105. URL: <https://doi.org/10.1063/1.5132543>
36. Chen J., Zhang G., Li B. Molecular Dynamics Simulations of Heat Conduction in Nanostructures: Effect of Heat Bath. *Journal of the Physical Society of Japan*. 2010. Vol. 79, no. 7. P. 074604. URL: <https://doi.org/10.1143/jpsj.79.074604>

37. Maznev A. A. Boundary scattering of phonons: Specularity of a randomly rough surface in the small-perturbation limit. *Physical Review B*. 2015. Vol. 91, no. 13. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.91.134306>
38. Marconnet A. M., Asheghi M., Goodson K. E. From the Casimir Limit to Phononic Crystals: 20 Years of Phonon Transport Studies Using Silicon-on-Insulator Technology. *Journal of Heat Transfer*. 2013. Vol. 135, no. 6. URL: <https://doi.org/10.1115/1.4023577>
39. Molecular dynamics study on thermal conductivity of nanoscale thin films / X. Feng et al. *Chinese Science Bulletin*. 2001. Vol. 46, no. 7. P. 604–607. URL: <https://doi.org/10.1007/bf02900421>
40. Molecular dynamics simulations of thermal transport in porous nanotube network structures / V. Varshney et al. *Nanoscale*. 2011. Vol. 3, no. 9. P. 3679. URL: <https://doi.org/10.1039/c1nr10331h>
41. <https://docs.quantumatk.com/manual/Introduction.html#introduction>
42. https://docs.quantumatk.com/guides/builder_manual/builder_introduction/builder_introduction.html
43. https://docs.quantumatk.com/tutorials/intro_calculators/intro_calculators.html
44. Alfè D. PHON: A program to calculate phonons using the small displacement method. *Computer Physics Communications*. 2009. Vol. 180, no. 12. P. 2622–2633. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2009.03.010>
45. <https://docs.lammps.org/Manual.html>
46. https://docs.lammps.org/Intro_overview.html
47. Cao A., Qu J. Size dependent thermal conductivity of single-walled carbon nanotubes. *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 112, no. 1. P. 013503. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4730908>

48. Thermal conductivity of MoS₂ monolayers from molecular dynamics simulations / A. Krishnamoorthy et al. AIP Advances. 2019. Vol. 9, no. 3. P. 035042. URL: <https://doi.org/10.1063/1.5085336>
49. Molecular Dynamics Simulations of Thermal Conductivity of Germanene Nanoribbons (GeNR) with Armchair and Zigzag Chirality / M. A. Balatero et al. Applied Mechanics and Materials. 2015. Vol. 772. P. 67–71. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/amm.772.67>
50. Boone P., Babaei H., Wilmer C. E. Heat Flux for Many-Body Interactions: Corrections to LAMMPS. Journal of Chemical Theory and Computation. 2019. Vol. 15, no. 10. P. 5579–5587. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00252>
51. www.physics.nist.gov.
52. <https://docs.lammps.org/units.html>
53. Lattice vibrational modes and phonon thermal conductivity of monolayer MoS₂ / Y. Cai et al. Physical Review B. 2014. Vol. 89, no. 3. URL: <https://doi.org/10.1103/physrevb.89.035438>
54. O. Sukhanevych, R. Sukhanevych and A. Gilchuk, "Exploring Nanoscale Heat Transfer: Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Effective Thermal Conductivity in Silicon Nanofilms," 2024 IEEE 42nd International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2024, pp. 320-324, doi: 10.1109/ELNANO63394.2024.10756939
55. Electronic strengthening mechanism of covalent Si via excess electron/hole doping / H. Noda et al. Scientific Reports. 2023. Vol. 13, no. 1. URL: <https://doi.org/10.1038/s41598-023-42676-z>
56. О. С. Суханевич, А. В. Гільчук, Р. В. Суханевич, «Моделювання теплопровідності тонких плівок германію методами нерівноважної

молекулярної динаміки», XXII Всеукраїнська науково-практична конференція студентів, аспірантів та молодих вчених «Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики», Київ, Україна, 2024, с. 48 - 52

57. Wickramaratne D., Zahid F., Lake R. K. Electronic and thermoelectric properties of few-layer transition metal dichalcogenides. The Journal of Chemical Physics. 2014. Vol. 140, no. 12. P. 124710. URL: <https://doi.org/10.1063/1.4869142>
58. Formation Mechanism of a Rounded SiGe-Etch-Front in an Isotropic Dry SiGe Etch Process for Gate-All-Around (GAA)-FETs / Y. Zhao et al. 2021 5th IEEE Electron Devices Technology & Manufacturing Conference (EDTM), Chengdu, China, 8–11 April 2021. 2021. URL: <https://doi.org/10.1109/edtm50988.2021.9421041>
59. Design and Investigation of the High Performance Doping-Less TFET with Ge/Si_{0.6}Ge_{0.4}/Si Heterojunction / T. Han et al. Micromachines. 2019. Vol. 10, no. 6. P. 424. URL: <https://doi.org/10.3390/mi10060424>
60. Four-Period Vertically Stacked SiGe/Si Channel FinFET Fabrication and Its Electrical Characteristics / Y. Li et al. Nanomaterials. 2021. Vol. 11, no. 7. P. 1689. URL: <https://doi.org/10.3390/nano11071689>
61. Pop E., Goodson K. Thermal Phenomena in Nanoscale Transistors // Journal of Electronic Packaging, Transactions of the ASME. — 2004.
62. Enhanced Thermal Transport Properties of Graphene/SiC Heterostructures on Nuclear Reactor Cladding Material: A Molecular Dynamics Insight /L. Wu, X. Sun, J. Luo, C. Yin, Z. Sun, R. Xiao //Nanomaterials. — 2022.
63. <https://blogs.sw.siemens.com/calibre/2024/11/19/navigating-esd-challenges-in-2-5d-3d-ics-a-guide-to-robust-automated-verification/>

