МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ КОМП'ЮТЕРНОЇ ФІЗИКИ ТА ЕНЕРГЕТИКИ
Кафедра комп'ютерної фізики

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до кваліфікаційної роботи
за освітньо-кваліфікаційним рівнем магістр

«Фононні процеси теплопередачі в паралельних наноплівках із боковим контактом»

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-64
Уманцев О.О.
Спеціальність: 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали»
Освітньо-наукова програма: «Комп'ютерна фізика»
Керівник: Геращенко Н.О.
Консультант: Нємченко К.Е.
Рецензент:

Харків – 2025

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Навчально-науковий інститут комп'ютерної фізики та енергетики

Кафедра комп'ютерної фізики

Рівень вищої освіти (освітньо-кваліфікаційний рівень) магістр

Спеціальність 105 Прикладна фізика та наноматеріали

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

_____ Костянтин НЄМЧЕНКО

підпис

"_____"_____2025 року

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

Уманцеву Олександру Олександровичу

1. Тема роботи «Фононні процеси теплопередачі в паралельних наноплівках із боковим контактом» керівник роботи: Геращенко Надія Олексіївна, асистент кафедри, науковий консультант: Нємченко К. Е., професор. Затверджено наказом по університету від 20 січня 2025 року № 4201-5/147.

2. Строк подання студентом роботи 19.05.2025

3. Перелік питань, які потрібно вирішити:

1) Здійснити критичний огляд сучасних публікацій, що стосуються теплопереносу у наноплівках і плоских провідниках у балістичному, квазибалістичному та дифузійному режимах.

2) Проаналізувати існуючі аналітичні моделі та комп'ютерні методи для оцінки теплопровідності в залежності від геометричних параметрів (товщина, довжина, діаметр) та шорсткості поверхні провідника.

3) Узагальнити основні фізичні механізми фононного переносу тепла у наноструктурах: межовий розсіювання, дзеркальне та дифузне відбиття, перехід між режимами теплопереносу.

4) Розробити або адаптувати нові аналітичні підходи до опису теплових потоків у наноплівках із боковим тепловим контактом. Провести тестові обчислення для порівняння результатів різних методів на репрезентативних геометріях наноплівок і плоских провідників.

4. План роботи

№ з/п	Назви етапів роботи
1	Визначення фізичної постановки задачі
2	Спрощення температурного розподілу та інших наближень
3	Визначення теплового потоку між пластинами
4	Визначення граничних умов та їх фізичних обумовлень
5	Обговорення та визначення умов теплового балансу
6	Рівняння теплопереносу в плівках, та їх розв’язання
7	Загальний розв’язок задачі та визначення теплового опору конструкції
8	Аналіз граничних випадків
9	Формування висновків , та підготовка до захисту

5.Дата видачі завдання 15 січня 2025 року.

Студент _____ Олександр УМАНЦЕВ
підпис

Керівник роботи _____ Надія ГЕРАЩЕНКО
підпис

РЕФЕРАТ

Уманцев Олександр «Фононні процеси теплопередачі в паралельних наноплівках із боковим контактом»
Кваліфікаційна робота магістра з комп'ютерної фізики. – Х.: Харківській національний університет імені В. Н. Каразіна, 2025. – 37 с.

У роботі розглядаються особливості фононного теплопереносу в нанорозмірних плівкових структурах, що мають боковий тепловий контакт. У фокусі дослідження — вплив геометричних параметрів наноплівок, зокрема їхньої товщини, довжини, а також розміру області теплового контакту, на ефективність перенесення тепла в умовах, коли довжина вільного пробігу фононів є набагато меншою за розміри системи. Такий режим характерний для високотемпературних умов провідників, де домінують дифузійні механізми переносу. Основна увага приділена системам із боковим тепловим контактом, які є перспективними для застосування в енергоефективній електроніці та сенсорних технологіях.

Також запропоновано нові чисельні та аналітичні методи моделювання теплопереносу, що враховують реальні розміри області теплового контакту провідників. Розроблено підхід до узагальнення класичних формул теплопровідності на випадки скінченної довжини провідників та довільного співвідношення їхніх розмірів. Отримані результати можуть бути використані для точнішого проектування наноматеріалів із заданими тепловими характеристиками.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ, ГІДРОДИНАМІЧНИЙ РЕЖИМ, ШОРСТКІСТЬ ПОВЕРХНІ, БОКОВИЙ КОНТАКТ, ФОНОННЕ РОЗСІЮВАННЯ, РІВНЯННЯ БОЛЬЦМАНА, НАНОСТРУКТУРИ, ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА.

ABSTRACT

Umantsev Oleksandr “Phonon heat transfer processes in parallel nanofilms with lateral contact”

Master’s thesis in computer physics. – Kh.: V. N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – 37 p.

The work examines the features of phonon heat transfer in nanoscale film structures with lateral thermal contact. The focus of the study is the influence of the geometric parameters of nanofilms, in particular their thickness, length, and the size of the thermal contact region, on the efficiency of heat transfer in conditions when the phonon mean free path is much smaller than the dimensions of the system. This mode is typical for high-temperature conditions of conductors, where diffusion transport mechanisms dominate. The main attention is paid to systems with lateral thermal contact, which are promising for use in energy-efficient electronics and sensor technologies.

New numerical and analytical methods for modeling heat transfer are also proposed, which take into account the real dimensions of the thermal contact region of conductors. An approach to generalizing classical thermal conductivity formulas to cases of finite conductor lengths and arbitrary ratios of their sizes is developed. The results obtained can be used for more accurate design of nanomaterials with specified thermal characteristics.

KEYWORDS: THERMAL CONDUCTIVITY, HYDRODYNAMIC REGIME, SURFACE ROUGHNESS, LATERAL CONTACT, PHONON SCATTERING, BOLTZMANN EQUATION, NANOSTRUCTURES, HEAT TRANSFER.

ЗМІСТ

РОЗДІЛ 1. ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА У НАНОСТРУКТУРАХ 9
1.1 Загальні властивості перенесення тепла у наноструктурах 9
1.2. Перенесення тепла у нанокомпозитах 11
1.3. Модели эффективной теплопроводности композитов 14
1.4. Висновки до розділу 18
РОЗДІЛ 2. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ В ШАРУВАТИХ СТРУКТУРАХ 19
2.1. Основні поняття 19
2.2. Приклад з вікном 19
2.2. Приклад з вікном загальний коефіцієнт теплопередачі 22
2.2. Обговорення результатів 22
РОЗДІЛ 3. ТЕПЛОПЕРЕДАЧА В НАНОПЛІВКАХ ІЗ БОКОВИМ КОНТАКТОМ 24
3.1. Постановка задачі 24
3.2. Граничні умови 27
3.3. Розв’язок задачі 32
3.4. Висновок до розділу 34
ВИСНОВКИ 34
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 36

ВСТУП

Актуальність теми. У сучасній науці та інженерії проблема ефективного теплового керування в нанорозмірних системах стає все більш критичною. Зі зменшенням розмірів електронних компонентів до нанометрового масштабу виникають фундаментально нові фізичні явища, пов’язані з особливостями перенесення тепла. Традиційні моделі теплопровідності, засновані на припущенні суцільного середовища, втрачають свою ефективність у випадках, коли розміри структур стають співмірними або меншими за довжину вільного пробігу фононів.

Особливий інтерес становлять системи у вигляді паралельних наноплівок із боковим тепловим контактом, які широко застосовуються в мікроелектроніці, оптоелектроніці та сенсорних пристроях. У таких структурах ефективність теплопереносу істотно залежить не лише від матеріальних властивостей, а й від геометрії, характеру фононного розсіювання на межах, а також реальної форми області теплового контакту. У високотемпературному режимі, коли довжина вільного пробігу фононів є малою, теплоперенос відбувається переважно в дифузійному режимі, проте він також суттєво модифікується мікроструктурними особливостями.

Існуючі теоретичні підходи зазвичай припускають нескінченну довжину провідників або ідеалізовані граничні умови. Це обмежує їхню придатність для опису теплових процесів у реальних пристроях. Таким чином, виникає нагальна потреба у вдосконаленні чисельних та аналітичних моделей, які б враховували скінченність розмірів провідників, складну геометрію контактів і шорсткість поверхонь.

Запропоновані в даному дослідженні нові підходи дозволяють наблизитися до реалістичного моделювання теплових процесів у наноплівкових системах. Це має велике значення для подальшого розвитку нанотехнологій, теплового дизайну пристроїв і створення енергоефективних компонентів сучасної електроніки.

Основною метою дипломної роботи є теоретичне обґрунтування особливостей фононного теплопереносу в наноплівкових структурах із боковим тепловим контактом з урахуванням впливу геометричних параметрів провідників та характеру контактної області.

Об’єкт дослідження – перенесення тепла в складних структурах.

Предмет дослідження – особливості теплопередачі в паралельних наноплівках із боковим контактом.

Методи дослідження – розв’язання аналітичних задач, зокрема, диференціальних рівнянь в системах зі складною геометрією, а також порівняльний аналіз отриманих результатів із класичними підходами до опису перенесення тепла.

Наукова новизна одержаних результатів – розв’язано задачу про перенесення тепла в паралельних наноплівках із боковим контактом, здобуто оригінальні результати, запропоновано пропозицій для практичного втілення цих результатів.

Практичне значення отриманих результатів: Запропоновані методи дозволяють більш точно прогнозувати теплові характеристики наноплівкових структур із врахуванням реальних геометричних параметрів і властивостей поверхонь, що відкриває нові можливості для:

– оптимізації конструкції наноматеріалів і нанопристроїв з ціллю підвищення їх енергоефективності;

– проектування систем теплового контролю в мікроелектроніці, сенсорній техніці та оптоелектроніці;

– підвищення надійності та довговічності електронних компонентів за рахунок ефективного управління тепловими потоками.

Структура і обсяг роботи. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 37 сторінок, із них основного тексту 30 сторінок, 1 рисунок за текстом, список використаних джерел із 39 найменувань на 2 сторінках.

РОЗДІЛ 1. ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА У НАНОСТРУКТУРАХ

1.1 Загальні властивості перенесення тепла у наноструктурах

У наномасштабних системах процеси перенесення тепла суттєво відрізняються від класичних макроскопічних уявлень, заснованих на рівнянні теплопровідності Фур'є. Це пов’язано з тим, що при зменшенні розмірів системи до нанометрового рівня відбувається порушення припущення про локальну термодинамічну рівновагу, яке є фундаментом класичної теорії. У таких умовах довжина вільного пробігу теплових носіїв — таких як фонони в діелектриках і електрони в металах — стає співмірною або навіть перевищує характерні геометричні розміри провідного елемента.

У результаті цього виникає новий режим теплоперенесення, відомий як балістичний режим, за якого теплові носії можуть переміщуватися крізь матеріал без значущих взаємодій або розсіювань між собою. У такій ситуації класичне дифузійне наближення вже не застосовується, і опис теплоперенесення потребує врахування кінетичних ефектів, наприклад, через розв’язання рівняння Больцмана для фононів або електронів.

Особливо важливу роль у цьому режимі відіграють процеси розсіювання на межах, зокрема на поверхнях, міжфазних границях та дефектах. Такі розсіювання можуть суттєво знижувати ефективну теплопровідність системи, навіть якщо сам матеріал має високу об’ємну теплопровідність у масивному вигляді. Цей ефект є критичним для розробки наноструктурованих термоелектриків, нанодроту, графенових і тонкоплівкових систем, де контроль і моделювання теплового транспорту на нанорівні мають вирішальне значення для ефективності та надійності пристроїв.

1.1.1. Основні механізми перенесення тепла

У наноструктурах тепло передається переважно за рахунок фононів — квантів коливань кристалічної решітки. Існує два основні режими теплопереносу:

Дифузний режим — характерний для макроскопічних тіл, де фонони багаторазово взаємодіють між собою, і температура змінюється згідно з рівнянням Фур'є.

Балістичний режим — реалізується при низьких температурах або в наноструктурах, коли довжина вільного пробігу фононів більша або співмірна з розмірами системи.

Межа між цими режимами описується **числом Кнудсена (Kn)** — відношенням довжини вільного пробігу до характерного розміру системи. При $Kn \gg 1$ система перебуває у балістичному режимі, при $Kn \ll 1$ — у дифузному.

1.1.2. Роль геометрії та граничних умов

У наноструктурах з прямокутним або циліндричним перерізом перенесення тепла залежить від геометричних параметрів, зокрема товщини, ширини та довжини. Значну роль відіграє шорсткість або дзеркальність границь: гладкі поверхні забезпечують дзеркальне відбиття фононів, тоді як шорсткі — дифузне. Різні ступені акомодації фононів при взаємодії з поверхнею суттєво змінюють ефективну теплопровідність.

Аналітичні та чисельні моделі

Для опису теплового переносу в нанорозмірних структурах використовуються як аналітичні, так і чисельні методи. Серед них:

Балістично-дифузні моделі — поєднують розв'язання рівнянь переносу з урахуванням межових умов.

Метод Больцмана з релаксаційним наближенням — описує еволюцію фононного розподілу.

Метод Монте-Карло — застосовується для моделювання траєкторій великої кількості фононів.

Метод дискретних осередків — використовує розбиття структури на частини з локальними рівновагами.

Окрему увагу приділяють задачам з аналітичними розв’язками для простих геометрій (прямокутники, циліндри), що дозволяє перевірити точність чисельних методів.

Застосування та перспективи

Розуміння особливостей теплопереносу у наноструктурах є критично важливим для створення ефективних теплових інтерфейсів, термоелектричних пристроїв, мікро- та наноелектроніки. Сучасні мікропроцесори та квантові пристрої стикаються з проблемою надмірного тепловиділення, а класичні методи охолодження стають неефективними. Тому контроль та оптимізація теплових потоків у нанорозмірних каналах, плівках та провідниках є актуальним науковим і технічним завданням.

1.2. Перенесення тепла у нанокомпозитах

Проблема теплопровідності в неоднорідних матеріалах математично аналогічна задачам електропровідності, діелектричної проникності та магнітної проникності таких матеріалів. Вивчення цих питань бере початок з ранніх робіт Максвелла та Лорда Релея [1, 2]. Починаючи з кінця XIX століття було запропоновано багато моделей, які дозволяють передбачити ефективну теплопровідність різних типів композитних матеріалів. У більшості ранніх моделей не враховувався міжфазний тепловий опір (ITR) між матрицею та наповнювачем. Проте пізніші дослідження показали, що цей тип теплового опору може мати значний вплив на значення ефективної теплопровідності [3, 4].

Перші вирази для ефективної теплопровідності композитних матеріалів з урахуванням впливу ITR були виведені Гассельманом і Джонсоном [5] у 1980-х роках шляхом модифікації оригінальної моделі Максвелла. У цій

роботі представлено та порівняно найпоширеніші у літературі моделі ефективної теплопровідності композитних матеріалів — як з урахуванням міжфазного теплового опору, так і без нього.

Коли тепло проходить через межу між компонентами композитного матеріалу, на цій межі виникає температурний стрибок. Це порушення теплового потоку описується за допомогою теплового опору, відомого як **міжфазний тепловий опір (МТО, англ. ITR)**. Він відображає сумарний вплив двох типів теплових опорів.

Перший тип — це **тепловий контактний опір (TCR)**, який виникає внаслідок поганого механічного або хімічного зчеплення між фазами матеріалів.

Другий тип — це **тепловий міжфазний опір (TBR)**, який пов’язаний з різницею фізичних властивостей матеріалів, що контактують. Цей тип опору також відомий як **опір Капіци**, на честь П. Л. Капіци, який уперше зафіксував температурний стрибок на межі між рідким гелієм і металами [6].

Міжфазний тепловий опір (МТО) визначається як відношення температурного стрибка, що виникає на межі, до теплового потоку на одиницю площі, який проходить через межу між двома фазами, згідно з рівнянням:

Розглянемо природу теплового міжфазного опору. Навіть за ідеального контакту на атомному рівні, межа між двома твердими фазами чинить опір тепловому потоку. Це зумовлено відмінностями у вібраційних та електронних властивостях матеріалів, що контактують.

Тепловий носій (фонон або електрон), досягнувши межі, зазнає розсіювання, і ймовірність його проходження через межу залежить від наявності відповідних енергетичних станів з обох боків цієї межі [7].

Для опису теплопереносу на межі «тверде тіло – тверде тіло» застосовуються акустична модель невідповідності (AMM) та модель дифузійної невідповідності (DMM) [7]. Ці моделі дозволяють розраховувати

значення теплового міжфазного опору (TBR), однак вони дають достовірні результати лише для температур нижче 40 К.

Для вищих температур більш точні результати дає модель невідповідності з урахуванням розсіювання (SMAMM), розроблена Прашером і Феланом [8]. Проте ця модель вимагає оцінки додаткових параметрів, які залежать від властивостей матеріалів. Це вносить небажану невизначеність у результати розрахунків [4].

Окрім акустичної невідповідності, існують й інші явища, що спричиняють збільшення теплового опору між компонентами композитного матеріалу. Локалізоване атомне безладдя поблизу межі може призводити до посиленого розсіювання фононів і фотонів. У цій же області часто виникають деформації кристалічної ґратки, спричинені тепловими напруженнями. Такі кристалічні дефекти також виступають розсіювачами фононів і фотонів.

Міжфазний тепловий опір (ITR) може бути пов'язаний із присутністю на межі тонких шарів матеріалу з іншими властивостями, ніж у матриці та наповнювача. Такі шари можуть утворюватися внаслідок взаємної дифузії, корозії компонентів композиту, покриття частинок, електрохімічної обробки частинок або поглинання вологи.

Погане зчеплення компонентів призводить до недосконалого механічного контакту, що збільшує компонент контактного теплового опору (TCR) у складі ITR. Також, невідповідність коефіцієнтів теплового розширення між компонентами може спричинити утворення щілин, заповнених газом у міжфазній області. У такій щілині теплопередача можлива лише за рахунок випромінювання та теплопровідності газу, отже вона діє як додатковий тепловий опір [9].

Експериментальні дослідження часткових (particulate) композитів показують, що додавання теплопровідних частинок до металевої матриці підвищує ефективну теплопровідність матеріалу лише у випадку відносно великого розміру частинок [3, 4]. Із зменшенням середнього радіуса частинок, ефективна теплопровідність знижується, оскільки площа

міжфазного контакту на одиницю об'єму зростає. У таких випадках ITR починає відігравати значну роль в загальному процесі теплопереносу. Тому надзвичайно важливо не ігнорувати вплив міжфазного теплового опору під час проєктування композитів.

1.3 Моделі ефективної теплопровідності композитів

У цьому підрозділі наведено найважливіші моделі з історичної та практичної точок зору. Було запропоновано багато моделей для прогнозування макроскопічних властивостей гетерогенної середовища, виходячи з властивостей і об’ємних часток компонентів. Ці моделі відомі як теорії ефективного середовища (EMT) або наближення ефективного середовища (EMA) і відносяться до класу теорій середнього поля. У цих моделях гетерогенні матеріали розглядаються як макроскопічно однорідні. Через свою природу наближення ефективного середовища не можуть точно передбачити властивості гетерогенного матеріалу за межами порогового значення перколяції. Лише нещодавно з’явилися методи, що враховують перколяцію [4, 10–12].

1.3.1. Модель Максвелла

Максвелл першим запропонував аналітичні вирази для ефективної теплопровідності гетерогенного середовища у своїй відомій праці з електрики та магнетизму [2]. Він розглянув задачу розрідженого розсіяння сферичних частинок з теплопровідністю k_1, розміщених у безперервній матриці з теплопровідністю k_m, при цьому теплові взаємодії між наповнювачами ігнорувалися [13].

1.3.2. Модель Релея

Релей [1] розглянув матеріал у вигляді сферичних включень, розташованих у простій кубічній решітці та вбудованих у безперервну матрицю. У своїх розрахунках він врахував теплову взаємодію між

частинками, тому можна очікувати, що його модель дасть кращі результати при вищих концентраціях наповнювача, ніж формула Максвелла. У знаменнику загальної можна побачити нескінченний ряд, у якому вищі порядки членів ігноруються. Якщо ігнорувати всі ці доданки, рівняння (3) спрощується до результату Максвелла (2). Проте робота Релея є важливою, оскільки вона містить аналітичні вирази для ефективної теплопровідності іншого типу композиту — безперервної матриці, армованої паралельними циліндричними волокнами, розташованими у уніаксіальній простій кубічній решітці . Теплопровідність такого матеріалу залежить від напрямку.

1.3.3. Модель Хассельмана-Джонсона

Хассельман і Джонсон наголосили, що для композиту з певною формою включень ефективна теплопровідність залежить не лише від об’ємної частки наповнювача, а й від розміру частинок. Більше того, вони дослідили вплив інтерфейсних зазорів між наповнювачем і матрицею на теплову дифузивність і теплопровідність композитів Niglass [17]. Ці спостереження вони пов’язали з наявністю інтерфейсного теплового опору. Незабаром після цього вони запропонували просту модифікацію початкових моделей Максвелла і Релея для виведення перших формул ефективної теплопровідності композитних матеріалів з ненульовим інтерфейсним тепловим опором [5].

Новизна формул Хассельмана-Джонсона полягає в залежності ефективної теплопровідності від радіуса частинки ааа та граничної теплопровідності hch_chc [Вт/(м²·К)], яка є оберненою величиною інтерфейсного теплового опору [7]. Автори вивели вирази для безперервної матричної фази з розрідженими концентраціями дисперсій сферичної (6), циліндричної (7) та пластинчастої геометрії (8). Вирази (6) і (7) є еквівалентами результатів Максвелла для сфер (2) та Релея для циліндрів, орієнтованих перпендикулярно напрямку теплового потоку (5). Вираз (8) стосується пластинчастих дисперсій, орієнтованих перпендикулярно до теплового потоку [5].

1.3.4. Модель Бруггемана

Математичний формалізм, запропонований Бруггеманом [20] та уточнений Ландауером [21], дозволяє оцінювати багато ефективних властивостей гетерогенних матеріалів, таких як електрична і теплопровідність, теплова дифузивність, магнітна проникність або електрична проникність. Основний підхід цієї теорії полягає в тому, що композитний матеріал можна поступово формувати, вводячи нескінченно малі зміни до вже існуючого матеріалу. Цей підхід призводить до диференціальних рівнянь, через що він називається теорією диференціального ефективного середовища або схемою диференціального ефективного середовища (DEM).

Перевагою цієї схеми є те, що вона охоплює широкий спектр матеріалів, таких як композити, нанорідини, пористі матеріали, аерозолі, космічний пил тощо. Вона також дає формули для багатокомпонентних систем, на додачу до класичного випадку двокомпонентних систем. Серед класичних теорій ефективного середовища модель Бруггемана вважається найточнішою для високих об’ємних часток наповнювача.

1.3.5. Модель Льюїса-Нільсена

Ця емпірична модель є досить популярною у літературі та дає відносно хороші результати, незважаючи на те, що її рівняння не враховують інтерфейсний тепловий опір (ITO). Модель була створена для помірних об’ємних часток наповнювача (до 40%). Для вищих значень вона стає нестабільною [10]. Перевагами моделі Льюїса-Нільсена є її простота та можливість застосування до широкого спектра форм і розташувань частинок.

1.3.6. Модель перколяції

Зі збільшенням кількості наповнювача на одиницю об'єму досягається певний момент, коли частинки наповнювача починають стикатися між

собою. Припускаючи, що наповнювач має високу теплопровідність, передача тепла між двома з'єднаними частинками відбувається легше, ніж між частинкою та матрицею. Зі збільшенням об'ємної частки наповнювача починають утворюватися ланцюжки з'єднаних провідних частинок. Ці ланцюжки діють як канали з підвищеною теплопровідністю.

Формування таких провідних каналів спричиняє значне зростання ефективної теплопровідності матеріалу. Цей ефект проявляється у вигляді переходу від пологого до крутого нахилу графіка ефективної теплопровідності залежно від об'ємної частки наповнювача. Точка або об'ємна частка, при якій відбувається цей перехід, відома як поріг перколяції.

Термін «перколяція» спочатку використовувався для опису проходження рідини через пористу речовину або дрібні отвори, але згодом його значення було розширене для опису явища утворення провідних каналів у багатьох типах транспортних процесів — наприклад, в електричних ланцюгах, громадському транспорті чи поширенні хвороб. Приклад перколяції в композитному матеріалі схематично показано на рис. 5, де ланцюг високо теплопровідних частинок наповнювача підсилює теплопередачу між нагрівачем і охолоджувачем.

Загалом, наближення ефективного середовища не можуть точно передбачити властивості багатофазного середовища поблизу порогу перколяції. Існують спроби подолати цю недосконаліть, і одним із найефективніших методів моделювання перколяції є чисельне моделювання.

Чисельну модель, що дозволяє прогнозувати ефективну теплопровідність композитного матеріалу, включаючи моделювання перколяції та інтерфейсного теплового опору (ІТО), запропонували Девпура та співавт. [4, 10]. Їхній алгоритм використовує матричну алгебру для представлення матеріалу і виконання розрахунків. Матеріал моделюється як складений із кубічних блоків, сторона яких дорівнює розміру частинок наповнювача. Кожен блок може бути або блоком матриці, або блоком частинок наповнювача. Сферичність частинок враховується за допомогою

додаткового параметра. Теплопровідність блоків наповнювача встановлена значно вищою за теплопровідність матриці. Інтерфейсний тепловий опір призначається для граней, на яких матеріал з одного боку відрізняється від матеріалу з іншого. Значення ITO оцінюється за допомогою моделі акустичної межі (AMM), тому включає лише компонент теплового бар'єра.

Незважаючи на простоту моделі, її прогнози добре узгоджуються з експериментальними результатами. На рисунку 6 наведено порівняння прогнозів ефективної теплопровідності композиту з двомодальним розподілом наповнювача Al_2O_3 (розміри 65 та 9 мкм) у поліетиленовій матриці, отриманих за допомогою різних популярних моделей, із експериментальними даними. Метод теплової хвилі широко застосовується на практиці. У 2009 році Фанг та співавтори [30] використали метод теплової хвилі для дослідження несталої ефективної теплопровідності окремих композитів із функціонально градієнтним інтерфейсом. Аналітичне розв'язання для несталої ефективної теплопровідності композиту з покритими частинками наведено у роботах [31, 32]. Розсіювання теплових хвиль у такому матеріалі теоретично досліджується методом розкладу у хвильові функції. Порівняння з результатами для сталого ефективного теплопереносу підтверджує коректність динамічної теплової моделі.

1.4. Висновки до розділу

З 19 століття було запропоновано численні аналітичні вирази для оцінки ефективної теплопровідності композитних матеріалів. Основні формули застосовувалися для сферичних наповнювачів [1, 2], проте пізніше були розроблені моделі, які враховують інші форми частинок [2, 16, 25, 28], наявність покриття частинок [31, 32] та міжфазний тепловий опір [3, 5, 18, 19]. Моделі класу апроксимацій ефективного середовища (Effective Medium Approximations, EMT) зазвичай не здатні точно прогнозувати властивості багатофазних матеріалів поблизу та вище порогу перколяції. Це проявляється у значному недооцінюванні ефективної теплопровідності цими моделями

(особливо популярною моделлю Хассельмана-Джонсона) при великих об’ємних частках наповнювача.

РОЗДІЛ 2. ТЕПЛОПРОВІДНІСТЬ В ШАРУВАТИХ СТРУКТУРАХ

Дослідники – початківці часто мають труднощі з розумінням поняття коефіцієнта теплопередачі, навіть якщо вони добре знайомі з поняттям теплопровідності. Приклад тепловтрат через одно- та двокамерні вікна (який розглядається далі в цьому розділі) допомагає подолати це непорозуміння; встановлюється корисний зв’язок з добре знайомими повсякденними обставинами.

2.1. Основні поняття

В основному даслідники знайомі з методом розрахунку теплового потоку вздовж ізольованого стрижня, як показано. Це передбачає безпосереднє застосування рівняння теплопровідності (яке часто називають законом Фур'є).

Також необхідно, щоб було зрозумілим поняття температури на межі поділу. Його можна ввести за допомогою задачі про складену пластину, яка є водночас цікавою та актуальною. У цій задачі припускається, що є дві пластини з однаковою площею перерізу, різними товщинами, а також з різними теплопровідностями.

Потік теплоти через кожну з пластин є однаковим; це аналогічно до закону Ома: потік теплоти замість електричного струму; ΔT виконує роль рушійної сили, тобто різниці потенціалів; а вирази 1/k є тепловими опорами. Такі рівняння можна узагальнити для опису теплового потоку через композит, що складається з багатьох шарів.

2.2. Приклад з вікном

Один із знайомих прикладів — це втрата тепла через закриті вікна. Студентів можна заохотити оцінити ці втрати, використовуючи вищенаведену теорію. Для ілюстративних цілей припустимо, що вікна мають такі характеристики: для односкладових вікон — скло товщиною 4 мм з

теплопровідністю $k=1.05\,Wm^{-1}K^{-1}k = 1.05$; для двоскладових вікон — воздушну щілину товщиною 12 мм, для якої приймають теплопровідність $0.023\,Wm^{-1}K^{-1}$

Площа засклення приймається рівною 3 м², температура в кімнаті — 20 °C, а температура зовнішнього повітря — -4 °C. Можна стверджувати, що для обчислень слід використовувати температуру у Кельвінах, а не в градусах Цельсія.

Проте числові результати не змінюються, оскільки різниця температур однакова як у Кельвінах, так і в градусах Цельсія.

Це є нагодою підкреслити, що нормальна інженерна практика не завжди суворо дотримується системи SI, тому градуси Цельсія тут залишаються.

Останнє значення явно є надмірним, адже 18,9 кВт — це більше, ніж теплова потужність для опалення всього будинку!

Якби температура внутрішньої поверхні скла була 20 °C, а зовнішньої — -4 °C, то теплові втрати справді перевищували б 18 кВт.

У цей момент виникає нагода наголосити, що завжди слід чітко формулювати свої припущення. Результат припускає, що зовнішнє повітря, яке прилягає до вікна, має постійну температуру -4 °C, незважаючи на значний тепловий потік назовні.Аналогічно, з боку кімнати температурний градієнт відсутній. Модель, що була неявно припущена — і яку явно показано — є нереалістичною.

Можна ввести іншумодель, яка є значно реалістичнішою, хоча все ще не точною. Інженер має навчитися використовувати розумні наближення та вміти давати найкращу оцінку за неповними даними. У певному сенсі ця задача ілюструє таку ситуацію.

Після інтуїтивного усвідомлення того, що поблизу обох меж скло–повітря існують області, в яких температура змінюється від температури об’єму повітря до температури скла, доцільно ввести фізичну модель, яка дозволить здійснювати розрахунки.

Можна погодитися, що розумним наближенням буде припущення, що повітря — як з внутрішнього, так і з зовнішнього боку — можна подати у вигляді майже нерухомої плівки або прикордонного шару, в якому відбувається суттєва зміна температури, та однорідного об’єму з постійною температурою (ізотермічного).

Розумно припустити, що товщина плівки складе 2 мм з боку кімнати та 1,5 мм — ззовні, якщо швидкість вітру є малою. Якщо ж швидкість вітру більша, доречним є зменшення товщини до 1 мм. Перерахунок з урахуванням цих припущень має дати інші результатию

Товщини прикордонних шарів та відповідні значення тепловтрат є обґрунтованими, і модель (яка описує чисту теплопровідність крізь нерухомий шар) може викликати інтерес і в деяких випадках бути корисною.

Однак тут, безумовно, треба підкреслити, що основною метою є отримання значення теплового опору, і не має значення, чи є механізм тепловтрат комбінацією конвекції та теплопровідності — головне, щоб оцінка була достатньо точною.

Цей приклад не лише вводить поняття коефіцієнта тепловіддачі, а й демонструє, що поєднання теорії та емпіричних підходів є продуктивним. Розуміння фізики, що лежить в основі коефіцієнтів теплопередачі, сприяє кращому теоретичному розумінню.

Коефіцієнти, які виводяться згодом, не обов’язково пов’язані з якоюсь конкретною моделлю — їх можна розглядати як суто емпіричні коефіцієнти пропорційності, знання яких (разом з площею поверхні та різницею температур) дозволяє обчислити кількість переданого тепла.

Хоча завжди можна підібрати таку товщину прикордонного шару, яка дасть прийнятний результат, передбачити цю товщину для нової ситуації зазвичай неможливо. Водночас стає зрозуміло, що точне знання товщини шару не є критично важливим. Натомість важливими є коефіцієнти тепловіддачі прикордонного шару, які можна легко обчислити за допомогою прогнозних рівнянь. Вони дозволяють інженеру робити апріорні оцінки

ефективності за нових умов. Довіра до таких оцінок зростає, якщо прогнозне рівняння має теоретичне обґрунтування.

2.2. Приклад з вікном загальний коефіцієнт теплопередачі

Вищезазначений приклад можна використати для введення поняття загального коефіцієнта теплопередачі. Метод комбінування цих коефіцієнтів схожий на метод комбінування теплових опорів, і буде отримано аналог рівняння (7). Температури для поточного прикладу визначені на рисунку 4.

Пам’ятаючи, що потік тепла через скло та два прикордонні шари однаковий, студенти повинні отримати коефіцієнт теплопередачі для внутрішнього (кімнатного) прикордонного шару, та коефіцієнт теплопередачі для зовнішнього прикордонного шару.

Коефіцієнт теплопередачі зовнішнього шару залежатиме від швидкості вітру та положення вікна, які необхідно визначити, але точний механізм теплопереносу (наприклад, баланс між конвекцією і теплопровідністю) не має значення і є більш предметом наукового, а не інженерного інтересу.

Це, звичайно, загальний коефіцієнт теплопередачі U, і з наведеного рівняння видно, що його зв’язок з індивідуальними коефіцієнтами має обернену природу.

Можна зазначити, що це аналогічно сумуванню електричних опорів: термін зліва — загальний опір теплопередачі, а терміни справа — окремі опори.

2.2. Обговорення результатів

Можна зауважити, що припущення про застійний шар повітря між стеклами у подвійних вікнах теж є надмірним спрощенням. Циркуляційні потоки всередині замкнутого простору знижують ізоляційний ефект. Щоб зменшити ці втрати теплоізоляції, деякі виробники заповнюють цей простір інертними газами, які в декілька разів густіші за повітря. Конструкція рами також впливає на тепловтрати, і кінцеві значення загальних коефіцієнтів

теплопередачі для подвійних склопакетів коливаються в межах від 2,0 до 3,5 Вт/(м²·К). Це досить добре порівнюється з показником 7 Вт/(м²·К) для типових одинарних вікон, але різниця не настільки драматична, як спочатку можуть припускати студенти та інші.

Дослідницька цінність цього прикладу не обмежується введенням рівняння загального коефіцієнта теплопередачі. Тут відкривається можливість: (a) розвинути у нас розуміння природної конвекції, докладніше розглянувши фізичні процеси, що відбуваються в замкнутій порожнині між стеклами; (b) покращити наше розуміння примусової конвекції через вплив швидкості вітру на коефіцієнт теплопередачі зовнішнього повітряного шару.

РОЗДІЛ 3. ТЕПЛОПЕРЕДАЧА В НАНОПЛІВКАХ ІЗ БОКОВИМ КОНТАКТОМ

У цьому розділі розглядається основна задача даного дослідження – процес теплопереносу вздовж однієї координатної осі, але через контактну (бокову) межу між двома твердими пластинами. На відміну від класичних задач, де тепло передається через об’єм або вздовж одного матеріалу, тут основна увага зосереджена на тому, як саме відбувається передача тепла через поверхню контакту між двома тілами.

Така конфігурація є надзвичайно важливою для розуміння реальних інженерних ситуацій — зокрема, у композитах, багатошарових структурах, мікро- та наносистемах, де різні матеріали з’єднані між собою. При цьому вирішальну роль відіграє міжфазний тепловий опір (thermal boundary resistance), або опір Капиці, який визначає, наскільки ефективно тепло проходить з одного матеріалу в інший на межі контакту.

Особливу складність викликає опис теплового потоку, коли між матеріалами спостерігається недосконалий контакт — наприклад, через мікрошорсткість, наявність зазорів або інші дефекти, які можуть суттєво зменшувати ефективну теплопровідність системи. Тому задача такого типу вимагає як аналітичного підходу (через спрощені моделі), так і чисельного моделювання для точнішого урахування геометрії контакту, матеріальних параметрів і умов теплообміну.

3.1. Постановка задачі

Розглядається задача теплопереносу в системі з двох твердих пластинок, що щільно прилягають одна до одної через спільну бокову (контактну) поверхню. Геометрично система задається у двовимірному просторі з координатами x та y, де передача тепла відбувається вздовж осі x, при цьому контактна границя розміщена при $x=0x = 0$.

пластинка 1 займає область z > 0, а пластинка 2 — область z < 0. На межі z=0 відбувається тепловий контакт між пластинками. Геометрія задачі представлено на Рис. 1.

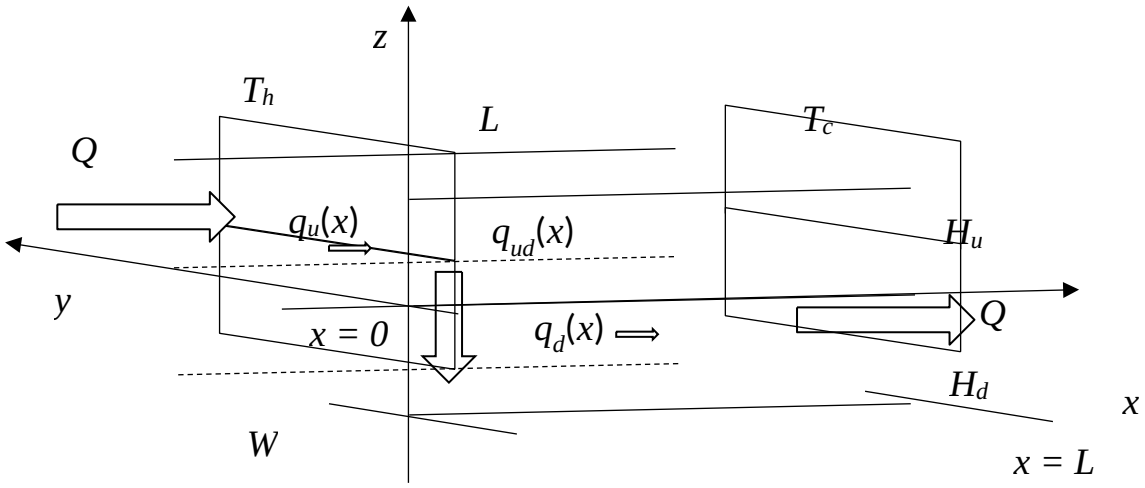


Рис. 1. Геометрія задачі

Постановка фізичної задачі виглядає так. Дано дві пластинки дуже малої висоти (практично наноплівки), які з'єднані своїми горизонтальними боковими поверхнями. Відомо, що тепловий потік входить у лівий торець верхньої пластинки та виходить через правий торець нижньої пластинки. Необхідно визначити, яка при цьому виникає різниця температур між лівим і правим краями всієї системи. Інакше кажучи, потрібно знайти ефективний коефіцієнт теплового опору такої конструкції.

Оскільки висота пластинок є дуже малою, розподілом температури по висоті всередині кожної з них можна знехтувати. Крім того, за умовами задачі передбачається, що і в поперечному напрямку (перпендикулярно осі x) температура також не змінюється. За таких припущень температури у верхній T_u та нижній T_d пластинках залежать лише від координати x.

$$T_u = T_u(x) \tag{1}$$

$$T_d = T_d(x). \quad (2)$$

Теплові потоки всередині пластин визначаються власними коефіцієнтами теплопровідності матеріалів, з яких виготовлені ці пластини: кожен матеріал має свої фізичні властивості, що характеризують здатність проводити тепло. Саме ці коефіцієнти теплопровідності визначають швидкість передачі тепла вздовж плівки при заданих температурних градієнтах. Таким чином, тепловий потік у кожній пластині залежить від її матеріалу, геометричних розмірів (товщини, довжини, ширини) та розподілу температури вздовж неї.

$$q_u = -\kappa_u grad T_u(x) \quad (3)$$

і

$$q_d = -\kappa_d grad T_d(x) \quad (4)$$

Потік тепла між пластинами визначається властивостями теплового контакту між ними, зокрема такими, як термічний опір на межі (контактний тепловий опір), якість з'єднання поверхонь, ступінь шорсткості, наявність проміжного шару (наприклад, оксидного чи повітряного), а також розмір і форма області контакту.

Ці параметри суттєво впливають на інтенсивність теплопередачі через межу, і саме через них у системі виникає додатковий перепад температур між верхньою і нижньою пластинами. Такий перепад зазвичай моделюється за допомогою граничної умови, яка пов'язує тепловий потік через межу з різницею температур на ній. Найчастіше це здійснюється через введення коефіцієнта теплопередачі або контактного теплопереносу α, так що локальний потік тепла між пластинами описується співвідношенням:

$$q_{ud}(\tilde{o}) = \alpha\{T_u(x) - T_d(x)\} \quad (5)$$

Таким чином, задача зводиться до знаходження розподілу температур у кожній з пластин з урахуванням теплопровідності вздовж осі x та теплообміну між ними через контактну поверхню.

При цьому в задачі вважається, що коефіцієнт теплопередачі α є заданим і однаковим в усіх точках контактної поверхні. Тобто, вважається, що якість теплового контакту є сталою по всій довжині з'єднання між пластинами, і не змінюється залежно від координати x.

Це суттєво спрощує математичну постановку задачі, оскільки дозволяє застосовувати рівняння теплопровідності з однаковими умовами передачі тепла на всьому інтерфейсі між пластинами. У такому разі контактна передача тепла моделюється за допомогою сталої величини α , що дозволяє розв’язати задачу аналітично або чисельно при мінімальній кількості додаткових параметрів.

3.2. Граничні умови

Повний тепловий потік, який заходить у верхню пластину через її лівий торець, дорівнює:

$$Q = q_u(x = 0)A_u = q_u(x = 0)H_u W \quad (6)$$

де A – площа поперечного перерізу пластини, H_u – її висота, а W – ее ширина.

Очевидно, що загальний тепловий потік, який заходить у конструкцію через лівий торець верхньої пластини, повинен бути рівним тепловому потоку, який виходить через правий торець нижньої пластини. Це випливає із закону збереження енергії: якщо система не має внутрішніх джерел або

поглиначів тепла, то кількість тепла, що надходить, повинна дорівнювати кількості тепла, що залишає систему.

$$Q = q_d(x = L)A_d = q_d(x = L)H_d W \quad (7)$$

тут H_d – висота нижньої пластини.

Нагадаємо, що введення повного теплового потоку є необхідним для коректного формулювання задачі, оскільки ми розглядаємо не лише пластини, виготовлені з різних матеріалів, але й такі, що мають різну висоту (товщину).

У випадку, коли матеріали та геометричні параметри обох пластин не збігаються, аналіз на рівні густини теплового потоку (тобто потоку на одиницю площі) стає незручним. Адже площі поперечного перерізу в обох пластинах різні, отже, одна й та сама густина потоку означатиме різну кількість тепла, що переноситься. Тому більш доцільно працювати з загальним тепловим потоком QQ, який залишається сталим уздовж усього шляху проходження тепла через конструкцію — від входу в лівий торець верхньої пластини до виходу через правий торець нижньої.

Таким чином, введення повного потоку дозволяє:

–уніфікувати опис теплопереносу незалежно від площі перерізу,

– коректно врахувати різну висоту пластин у розрахунках,

–і, найголовніше, забезпечити узгодженість при побудові моделі ефективного теплового опору системи.

За припущенням дуже тонких пластинок основні рівняння задачі (3) та (4) зводяться до одномірних рівнянь:

$$q_u = -\kappa_u \frac{d}{dx} T_u(x) \quad \text{та} \quad q_d = -\kappa_d \frac{d}{dx} T_d(x) \quad (8)$$

Нагадаємо, що величини $\kappa_{u,d}$ — це коефіцієнти теплопровідності відповідних матеріалів, і їх розмірність — W/K/m. Натомість коефіцієнт теплопередачі між двома речовинами, який ми позначаємо через α, має іншу розмірність — $W/K/m^2$.

Це пов'язано з тим, що теплопровідність характеризує здатність матеріалу проводити тепло всередині себе, а коефіцієнт теплопередачі — ефективність передавання тепла через поверхню контакту між різними середовищами.

Граничні умови для розв'язання рівнянь (8) відображають постановку цієї задачі. Щільність теплового потоку на вхідному торці верхньої пластинки, так само як і щільність потоку на вихідному торці нижньої пластинки, визначається як відношення повного теплового потоку до площі поперечного перерізу відповідної пластинки:

$$q_u(x=0) = -\kappa_u \frac{d}{dx} T_u(x)\Big|_{x=0} = \frac{Q}{H_u W} \tag{9a}$$

$$q_d(x=L) = -\kappa_d \frac{d}{dx} T_d(x)\Big|_{x=L} = \frac{Q}{H_d W} \tag{9b}$$

Ці умови дозволяють пов'язати аналітичне розв'язання з геометричними параметрами системи та забезпечують коректне формулювання задачі на теплообмін.

Крім того, необхідною є гранична умова для теплового потоку на протилежних (вільних) кінцях пластинок, через які перенесення тепла відсутнє. Це означає, що тепловий потік через ці границі дорівнює нулю. Таким чином, математично ці умови можна записати як:

$$q_u(x=L) = -\kappa_u \frac{d}{dx} T_u(x)\Big|_{x=L} = 0\,, \tag{10a}$$

та

$$q_d(x=0) = -\kappa_d \frac{d}{dx} T_d(x)\Big|_{x=0} = 0. \qquad (10b)$$

Ці граничні умови відповідають фізичному припущенню про відсутність теплового обміну на кінцях системи з навколишнім середовищем і дозволяють замкнути задачу для подальшого аналітичного або чисельного розв'язання.

Найсуттєвішою умовою для даної геометрії є гранична умова (5) на межі між пластинками — саме вона визначає тепловий потік через контактну поверхню в кожній точці цієї межі.

$$q_{ud}(\tilde{o}) = \alpha\{T_u(x) - T_d(x)\}. \qquad (5)$$

Усі ці граничні умови необхідно доповнити умовою балансу теплових потоків. Як з'ясувалося, це можна зробити двома способами.

Перший підхід — назвемо його «диференціальним» — базується на принципі збереження енергії в кожній точці контактної межі між пластинами. У цьому випадку припускається, що тепловий потік, який виходить із верхньої пластинки, в точності дорівнює потоку, який входить у нижню пластинку в тій самій точці межі. Це локальна умова, яка має вигляд:

$$q_u(\tilde{o}) = q_{ud}(\tilde{o}) + q_d(\tilde{o}) \qquad (11)$$

Цей підхід є природним для рівнянь теплопровідності в часткових похідних і дозволяє точно враховувати локальні особливості теплового контакту при чисельному або аналітичному розв'язанні задачі.

Другий підхід — *інтегральний* — ґрунтується на збереженні **загального теплового потоку** в системі. Відповідно до цього підходу, сумарний

тепловий потік, що передається через всю площу контактної межі між пластинами, повинен дорівнювати повному потоку тепла, який входить у верхню пластину, і, природно, — повному потоку, що виходить із нижньої пластини.

$$Q = W \int_0^L q_{ud}(\tilde{o}) dx \tag{12}$$

Такий інтегральний підхід є зручним при побудові аналітичних оцінок або спрощених моделей, особливо в тих випадках, коли температурне поле змінюється повільно по координаті, або коли потрібно розглядати середні характеристики системи, наприклад — ефективне теплове опір або коефіцієнт теплопередачі.

Еквівалентність цих двох підходів — диференціального та інтегрального — можна довести, якщо скористатися усіма граничними умовами задачі, зокрема умовами (5), (9), (10) та (11).

Зокрема: умова (5) задає тепловий потік між пластинами; умова (9) визначає тепловий потік що входить у верхню пластину, і який виходить із нижньої пластини; умова (10) гарантує відсутність теплового потоку через вільні торці пластин; а умова (11) встановлює локальний баланс теплових потоків на контактній межі, тобто описує теплопередачу між пластинами в кожній точці межі.

Якщо підставити ці граничні умови у відповідні рівняння теплопровідності та виконати інтегрування по довжині контактної ділянки, то отримаємо, що:

$$Q = W \int_0^L q_{ud}(\tilde{o}) dx$$

що, у свою чергу, збігається з формулюванням інтегрального підходу (12). Отже, за дотримання наведених граничних умов, обидва методи опису

теплового балансу — як локальний (диференціальний), так і глобальний (інтегральний) — приводять до одного й того ж фізично обґрунтованого результату.

3.3. Розв’язок задачі

Далі розв’язуємо дані рівняння з нашими граничними умова і получаємо остаточний шуканий результат. Відповідь до задачі зручно формулювати через загальний тепловий потік, тобто величину, яка описує сумарну кількість тепла, що проходить через всю конструкцію за одиницю часу. Це пов’язано з тим, що висоти двох пластин різні, а отже, площі їх поперечного перерізу, через які здійснюється теплоперенесення, також не однакові. У таких умовах порівнювати або виражати температуру чи густину теплового потоку (тепловий потік на одиницю площі) окремо для кожної пластини було б не зовсім коректно або, принаймні, не дуже зручно.

Використання саме загального теплового потоку Q дозволяє уникнути неоднозначностей, пов’язаних з різними геометричними параметрами системи, і зосередитися на основному — на тому, як загальна кількість тепла проходить через всю систему: входить в одну пластину, передається через контактну межу та виходить з іншої. У такій формі відповідь відображає реальну фізичну суть процесу та дозволяє зручно визначити, наприклад, ефективний тепловий опір всієї конструкції, не прив’язуючись до локальних значень температур чи площ.

Таким чином, різниця у висотах (і, відповідно, площах) обумовлює те, що саме інтегральні (загальні) характеристики є найбільш придатними для аналізу, порівняння та розрахунків.

$$\frac{T_u - T_d}{Q} = \frac{\lambda_d^2 \lambda_u^2}{\lambda_d^2 + \lambda_u^2} \frac{L}{W} \frac{1}{\alpha} \left\{ 1 + \frac{ch\lambda L + 1}{\lambda L sh\lambda L} \frac{\lambda_d^4 + \lambda_u^4}{\lambda_d^2 \lambda_u^2} \right\}. \tag{13}$$

Цей результат можна переписати, якщо врахувати тригонометричні тотожності.

$$\frac{ch\lambda L+1}{sh\lambda L}=\frac{e^{\lambda L}+e^{-\lambda L}+2}{e^{\lambda L}-e^{-\lambda L}}=\frac{\left(e^{\lambda L/2}+e^{-\lambda L/2}\right)^2}{\left(e^{\lambda L/2}-e^{-\lambda L/2}\right)\left(e^{\lambda L/2}+e^{-\lambda L/2}\right)}=\frac{\left(e^{\lambda L/2}+e^{-\lambda L/2}\right)}{\left(e^{\lambda L/2}-e^{-\lambda L/2}\right)}=cth\left(\frac{\lambda L}{2}\right)$$

З формули (13) тоді здобуваємо

$$\frac{T_u-T_d}{Q}=\frac{\lambda_d^2\lambda_u^2}{\lambda_d^2+\lambda_u^2}\frac{L}{W}\frac{1}{\alpha}\left\{1+\frac{\lambda_d^4+\lambda_u^4}{2\lambda_d^2\lambda_u^2}\frac{cth(\lambda L/2)}{\lambda L/2}\right\} \qquad (14)$$

Тут введено величини $\lambda_u^2=\frac{\alpha}{\kappa_u H_u}$ та $\lambda_d^2=\frac{\alpha}{\kappa_d H_d}$, та сумарна величина

$$\lambda_d^2+\lambda_u^2=\lambda^2 \qquad (15)$$

З урахуванням цих визначень маємо

$$\frac{T_u-T_d}{Q}=\frac{L}{W}\frac{1}{\kappa_d H_d+\kappa_u H_u}\left\{1+\left[\frac{\kappa_d H_d}{\kappa_u H_u}+\frac{\kappa_u H_u}{\kappa_d H_d}\right]\frac{cth(\lambda L/2)}{\lambda L}\right\} \qquad (16)$$

Це і є шуканий загальний результат нашої задачі, який визначає тепловий опір заданої конструкції при довільних товщина і матеріалах плівок у контакті. Здобута загальна формула дає можливість детально розглянути граничні випадки матеріалів із різним складом, а також плівок із різними розмірами. Також вона слугує базою, що дозволяє ефективно перевіряти чисельні алгоритми, призначені для дослідження більш складних конструкцій.

3.4. Висновок до розділу

Таким чином, отримане співвідношення (16) між повним тепловим потоком і різницею температур на вході та виході системи задає ефективний тепловий опір конструкції, що включає дві наноплівки з боковим тепловим контактом. Цей загальний результат враховує довільні товщини плівок, їх теплопровідності, а також властивості міжплівкового контакту, який характеризується певним коефіцієнтом теплопередачі.

Згідно з отриманим виразом, тепловий опір системи формується як послідовне з’єднання трьох опорів: двох від кожної плівки (що залежать від їх теплопровідності та геометрії) і одного контактного (який залежить від коефіцієнта теплопередачі та ширини контактної області). Такий підхід дозволяє не лише визначити кількісну величину теплового опору, але й провести аналіз впливу кожного параметра окремо.

Крім того, з отриманого загального виразу легко виділити граничні випадки: коли обидві плівки мають однакову товщину й матеріал, тепловий опір симетричний; коли одна з плівок набагато товща або теплопровідніша, загальний опір визначається слабшою (тоншою або менш теплопровідною) частиною; у випадку дуже великого або навпаки дуже малого коефіцієнта теплопередачі α можна описати перехід до ідеального теплового контакту або до теплоізоляції.

Отже, представлений підхід забезпечує універсальну базу для опису теплопереносу в багатьох фізичних ситуаціях, які виникають у сучасних нанотехнологіях, мікроелектроніці та енергетичних матеріалах.

ВИСНОВКИ

У дипломі детально досліджено особливості теплопереносу в нанорозмірних плівкових структурах із боковим тепловим контактом між пластинками. Виявлено, що геометричні параметри наноплівок — їхня товщина, довжина та розмір контактної площі — суттєво впливають на ефективність теплопереносу. Особливо це стосується режимів, коли довжина вільного пробігу фононів значно менша за розміри самої системи, що характерно для високотемпературних умов і призводить до домінування дифузійних механізмів переносу тепла. Значну увагу приділено аналізу систем із боковим тепловим контактом, які мають важливе практичне значення для розвитку енергоефективної електроніки та сенсорних пристроїв, де необхідний точний контроль теплових потоків на нанорівні.

У роботі запропоновано та реалізовано аналітичний метод моделювання теплопереносу, які враховують реальні розміри області теплового контакту і дозволяють виходити за межі класичних припущень про нескінченну довжину провідників. Розроблений підхід узагальнює традиційні формули теплопровідності на випадки скінченних розмірів наноплівок і довільних співвідношень їхніх геометричних параметрів.

Отримані загальні формули відкривають можливість детально розглянути граничні випадки матеріалів із різним складом, а також плівок із різними розмірами. Вони слугують надійною базою, що дозволяє ефективно перевіряти чисельні алгоритми, призначені для дослідження більш складних конструкцій. Результати роботи дають змогу точніше передбачати теплові характеристики наноструктур, що є важливим кроком для проектування нових пристроїв із заданими властивостями теплопереносу.

Таким чином, робота робить значущий внесок у теоретичне та прикладне розуміння теплопереносу в наноструктурах і відкриває перспективи для подальших досліджень у цій актуальній галузі нанофізики.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Schwab, K., Henriksen, E. A., Worlock, J. M., and Roukes, M. L., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 095901 (2002).
2. Rego, L. G. C., and Kirczenow, G., *Phys. Rev. Lett.* **81**, 232 (1998).
3. Moore, A. L., Saha, S. K., Prasher, R., and Majumdar, A., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 045901 (2008).
4. Xu, X., Pereira, L. F. C., Wang, Y., Wu, J., Zhang, K., Zhao, X., Bae, S., Bui, C. T., Xie, R., Thong, J. T. L., Hong, B. H., Loh, K. P., Donadio, D., and Li, B., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 195503 (2013).
5. Majumdar, A., *Phys. Rev. Lett.* **94**, 185501 (2005).
6. Meschke, M., Guichard, W., and Pekola, J. P., *Phys. Rev. Lett.* **93**, 046602 (2004).
7. Wingert, M. C., Chen, Z. C. Y., Dechaumphai, E., Moon, J., Kim, J. H., Xiang, J., and Chen, R., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 096601 (2013).
8. Chang, C. W., Okawa, D., Majumdar, A., and Zettl, A., *Phys. Rev. Lett.* **101**, 075903 (2008).
9. Hochbaum, A. I., Chen, R., Delgado, R. D., Liang, W., Garnett, E. C., Najarian, M., Majumdar, A., and Yang, P., *Phys. Rev. Lett.* **109**, 195901 (2012).
10. Lee, S., Broido, D., Esfarjani, K., and Chen, G., *Phys. Rev. Lett.* **118**, 145901 (2017).
11. Carrete, J., Gallego, L. J., Varela, L. M., & Mingo, N., Phys. Rev. B 84, 075403 (2011).
12. Ma, D., Ding, H., Meng, H., et al., Phys. Rev. B 94, 165434 (2016).
13. Hu, M., Zhang, X., Giapis, K. P., & Poulikakos, D., Phys. Rev. B 84, 085442 (2011).
14. Ojanen, T., & Heikkilä, T. T., Phys. Rev. B 76, 073414 (2007).
15. Highland, M., Gundrum, B. C., Koh, Y. K., et al., Phys. Rev. B 76, 075337 (2007).
16. Stock,E.,Dachner,M.R.,Warming, T.,et al.,Phys.Rev.B83,041304(R) (2011).

17. Zhou, J.-J., & Bernardi, M., Phys. Rev. B 94, 201201(R) (2016).
18. Liu, D., Every, A. G., & Tomanek, D., Phys. Rev. B 94, 165432 (2016).
19. Ge, X.-J., Yao, K.-L., & Lu, J.-T., Phys. Rev. B 94, 165433 (2016).
20. Chen, Y., & Nazarov, Y. V., Phys. Rev. B 103, 165424 (2021).
21. Çınar,M. N.,Sargın,G.Ö.,Sevim, K., et al., Phys. Rev. B 103, 165422 (2021).
22. Wise, J. L., & Basko, D. M., Phys. Rev. B 103, 165423 (2021).
23. Jansson, M., La, R., Tu, C. W., et al., Phys. Rev. B 103, 165425 (2021).
24. Geib, N., Sasmal, A., Wang, Z., et al., Phys. Rev. B 103, 165427 (2021).
25. Chaves,A.,Sousa,G.O.,Khaliji, K., et al., Phys. Rev. B 103, 165428 (2021).
26. Moras, P., Menteş, T. O., Schiller, F., et al., Phys. Rev. B 103, 165426 (2021).
27. Osca, J., & Sorée, B., Phys. Rev. B 102, 125436 (2020).
28. Eldridge,P.S.,Hübner,J., Oertel,S.,et al., Phys. Rev. B 83, 041301(R) (2011).
29. Trichet, A., Sun, L., Pavlovic, G., et al., Phys. Rev. B 83, 041302(R) (2011).
30. Levchenko,A.,Ristivojevic,Z.,Micklitz, T.,Phys.Rev.B83,041303(R) (2011).
31. Khalaf, E., & Ostrovsky, P. M., Phys. Rev. B 94, 165431 (2016).
32. Liu, D., Every, A. G., & Tomanek, D., Phys. Rev. B 94, 165432 (2016).
33. Ge, X.-J., Yao, K.-L., & Lu, J.-T., Phys. Rev. B 94, 165433 (2016).
34. Ma, D., Ding, H., Meng, H., et al., Phys. Rev. B 94, 165434 (2016).
35. Chen, Y., & Nazarov, Y. V., Phys. Rev. B 103, 165424 (2021).
36. Jansson, M., La, R., Tu, C. W., et al., Phys. Rev. B 103, 165425 (2021).
37. Geib, N., Sasmal, A., Wang, Z., et al., Phys. Rev. B 103, 165427 (2021).
38. Chaves, A., Sousa, G.O.,Khaliji, K., et al., Phys. Rev. B 103, 165428 (2021).
39. Moras, P.,Menteş, T.O., Schiller, F., et al.,Phys. Rev. B 103, 165426 (2021).