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

# «Теплопровідність тривимірних провідників прямокутного перерізу в балістичному режимі»

Виконав: студент 2 курсу, групи НФ-64
Соколов С.Р.
Спеціальність: 105 – «Прикладна фізика та наноматеріали»
Освітньо-наукова програма: «Комп'ютерна фізика»
Керівник: 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**

Соколову Сергію Романовичу

1. Тема роботи «Теплопровідність тривимірних провідників прямокутного перерізу в балістичному режимі» керівник роботи: 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) зробити огляд літератури, обчислювальних та теоретичних методів розрахунків коефіцієнту теплопровідності провідників з прямокутним перерізом циліндричної форми в залежності від розмірів та ступені шорсткості поверхні;

2) узагальнити основні підходи для опису перенесення тепла в нанопровідниках при балістичному русі фононів та дифузному розсіювання фононів на границях;

3) розробити та застосувати нові методи розв’язання прикладних задач про перенесення тепла в наноструктурах у системах з довільними співвідношеннями між розмірами провідника.

4. План роботи

| № з/п | Назви етапів роботи |
|---|---|
| 1 | Проведення систематичного аналізу наявних джерел з теоретичних та обчислювальних методів розрахунку коефіцієнта теплопровідності провідників з прямокутним та циліндричним перерізом. |
| 2 | Опис основних механізмів теплопереносу з урахуванням балістичного руху фононів та дифузного розсіювання на границях у наноструктурах, узагальнення існуючих моделей та підходів. |
| 3 | Розробка нових аналітичних та чисельних методів розв’язання задач перенесення тепла у нанопровідниках з довільними співвідношеннями геометричних розмірів, які враховують особливості балістичного та дифузного режимів. |
| 4 | Застосування розроблених методів до прикладних задач на прикладі нанопровідників із різними геометріями, порівняння з експериментальними даними та існуючими моделями для перевірки точності. |
| 5 | Детальне дослідження впливу параметрів поверхневої шорсткості на тепловий опір та ефективний коефіцієнт теплопровідності, включаючи моделювання взаємодії фононів із неоднорідностями на межах. |
| 6 | Формулювання рекомендацій щодо проектування нанопровідників з оптимальними тепловими характеристиками, розробка методичних вказівок для можливих застосувань у нанотехнологіях. |
| 7 | Формування списку цитованої літератури |
| 8 | Підготовка презентації та доповіді, обговорення диплому з науковим керівником |

5.Дата видачі завдання 15 січня 2025 року.

Студент _____ Сергій СОКОЛОВ
підпис

Керівник роботи _____ Костянтин НЄМЧЕНКО
підпис

# РЕФЕРАТ

Соколов Сергій «Теплопровідність тривимірних провідників прямокутного перерізу в балістичному режимі»
Кваліфікаційна робота магістра з комп'ютерної фізики. – Х.: Харківській національний університет імені В. Н. Каразіна, 2025. – 33 стр.

У цій роботі представлено дослідження теплопровідності тривимірних діелектричних провідників прямокутного поперечного перерізу, що функціонують у балістичному режимі переносу фононів. Аналіз виконується в межах радіаційного наближення, згідно з яким фонони випромінюються нагрівачем і охолоджувачем, що підтримуються при фіксованих температурах, а взаємодія фононів із бічними стінками провідника розглядається як повністю дифузійна.

Запропонована методологія ґрунтується на розв'язанні інтегрального рівняння та дозволяє отримати явний аналітичний вираз для теплопровідності за довільних співвідношень між довжиною, шириною та товщиною провідника. Отримані результати істотно відрізняються від традиційного підходу на основі лінійного температурного градієнта, в якому зовнішні джерела накладають фіксований градієнт температури вздовж зразка.

Ці відмінності стають особливо помітними при аналізі ролі довжини вільного пробігу фононів — ключового параметра у виразі для коефіцієнта теплопровідності, пов'язаного з ефективною швидкістю фононів та теплоємністю фононної системи. Крім того, робота містить порівняння теоретичних передбачень з експериментальними даними, підкреслюючи важливість узгодження моделі з конкретною методикою проведення експерименту.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: БАЛІСТИЧНИЙ РЕЖИМ, ПЕРЕНЕСЕННЯ ТЕПЛА, ФОНОНИ, ДІФУЗНЕ ВІДБИТТЯ, ШВИДКІСТЬ, ТЕПЛОЄМНІСТЬ.

ABSTRACT

Sokolov Sergey "Thermal conductivity of three-dimensional conductors of rectangular cross-section in the ballistic regime"

Master's degree thesis in computer physics. – Kh.: V. N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – 33 p.

This paper presents a study of the thermal conductivity of three-dimensional dielectric conductors of rectangular cross-section operating in the ballistic regime of phonon transport. The analysis is performed within the radiation approximation, according to which phonons are emitted by a heater and a cooler, which are maintained at fixed temperatures, and the interaction of phonons with the side walls of the conductor is considered to be completely diffusional.

The proposed methodology is based on the solution of the integral equation and allows obtaining an explicit analytical expression for thermal conductivity for arbitrary ratios between the length, width and thickness of the conductor. The results obtained differ significantly from the traditional approach based on a linear temperature gradient, in which external sources impose a fixed temperature gradient along the sample.

These differences become especially noticeable when analyzing the role of the phonon mean free path, a key parameter in the expression for the thermal conductivity coefficient related to the effective phonon velocity and the heat capacity of the phonon system. In addition, the paper contains a comparison of theoretical predictions with experimental data, emphasizing the importance of matching the model with the specific experimental methodology.

KEYWORDS: BALLISTIC MODE, HEAT TRANSFER, PHONONS, DIFFUSE REFLECTION, VELOCITY, HEAT CAPACITY.

ЗМІСТ

ВСТУП .....7

1 АНАЛІЗ БАЛІСТИЧНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ТРИВИМІРНИХ ПРОВІДНИКІВ .....9

1.1Вступ до розділу .....9

1.2 Класифікація режимів теплопереносу.....10

1.3Теоретичні підходи до балістичного теплопереносу .....11

1.4 Огляд експериментальних методик і виклики .....13

1.5 Обґрунтування обраного підходу .....14

1.6 Висновки до розділу .....15

2 ТЕОРЕТИЧНА МОДЕЛЬ БАЛІСТИЧНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ

2.1 Постановка задачі моделювання……16

2.2 Використання кінетичного підходу……...17

2.3 Побудова математичної моделі теплопереносу……...18

2.4 Вплив граничних умов і геометрії……21

2.5 Висновки до розділу……22

3 ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ І АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

3.1 Методика чисельного моделювання…… 23

3.2 Проведення розрахунків……24

3.3 Аналіз отриманих результатів……26

3.4 Висновки до розділу……27

ВИСНОВКИ .....29

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....30

# ВСТУП

**Актуальність теми.** Сучасний етап розвитку науки і техніки характеризується інтенсивною мініатюризацією елементів електроніки, енергетичних систем, сенсорних пристроїв та інших високотехнологічних компонентів. Зменшення розмірів функціональних елементів до мікро- і нанорівня призводить до того, що класичні уявлення про теплоперенесення, зокрема закон Фур'є, втрачають свою адекватність. У таких системах основним механізмом переносу енергії стає балістичне поширення фононів — теплових квазічастинок, які не встигають взаємодіяти між собою в межах пристрою, а взаємодіють лише з його межами. Саме тому дослідження теплопровідності у балістичному режимі є надзвичайно актуальним.

Особливий інтерес викликають провідники прямокутного поперечного перерізу, які найчастіше зустрічаються у реальних пристроях — мікросхемах, теплообмінниках, елементів MEMS та NEMS. Геометричні характеристики таких провідників (довжина, ширина, товщина), а також відбивні властивості їхніх стінок мають вирішальне значення для формування теплового потоку та температурного профілю. В умовах слабкої дисипації і домінування поверхневих ефектів навіть незначна шорсткість чи топологічна неоднорідність поверхні може істотно змінити тепловий опір.

Балістичний режим є також важливим об'єктом фундаментальних досліджень — саме в таких умовах з'являються нові фізичні ефекти, які не проявляються в класичних макроскопічних системах. Застосування аналітичних і чисельних методів, зокрема розв'язання інтегральних рівнянь для теплового потоку у тривимірних геометріях, відкриває шлях до точного моделювання таких процесів.

Отже, вивчення теплопровідності в балістичному режимі для прямокутних провідників є актуальною задачею як для прикладної фізики, так і для створення енергоефективних, стабільних та надійних нанопристроїв нового покоління.

**Основною метою** дипломної роботи є розробка та застосування нових методів розв’язання прикладних задач про перенесення тепла в прямокутних наноструктурах з довільними співвідношеннями між розмірами провідника.

**Об’єкт дослідження** – теплопровідність нанорозмірних структур.

**Предмет дослідження** – основні підходи для опису перенесення тепла в нанопровідниках при балістичному русі фононів та дифузному розсіювання фононів на границях;

**Методи дослідження –** аналітичні та обчислювальні методи знаходження транспортних властивостей нанопровідників.

**Наукова новизна одержаних результатів –** нові методи розв’язання прикладних задач про перенесення тепла в наноструктурах у системах з довільними співвідношеннями між розмірами провідника.

**Практичне значення отриманих результатів:**

Узагальнені моделі та чисельні методи розрахунку коефіцієнта теплопровідності в залежності від геометрії та шорсткості поверхні дозволяють оптимізувати тепловідвід у мікро- та наноелектроніці.

Узагальнення підходів до опису перенесення тепла при балістичному режимі дозволяє враховувати специфіку фононного транспорту в нових функціональних матеріалах, зокрема в двовимірних системах, напівпровідникових нанодротах, тонкоплівкових покриттях тощо.

Запропоновані нові методи розв’язання прикладних задач дають змогу будувати швидкодіючі обчислювальні моделі, які можуть бути впроваджені в системи автоматизованого проєктування теплових систем у нанотехнологіях.

**Структура і обсяг роботи**. Магістерська робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Загальний обсяг роботи становить 33 сторінок, із них основного тексту 23 сторінки, 1 графік, список використаних джерел із 42 найменувань на 4 сторінках

# РОЗДІЛ 1. АНАЛІЗ БАЛІСТИЧНОЇ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ ТРИВИМІРНИХ ПРОВІДНИКІВ

## 1.1 Вступ до розділу

Традиційні уявлення про теплоперенос у макроскопічних тілах ґрунтуються на припущенні про дифузійний характер процесу, який успішно описується законом Фур'є. У масивних кристалах та об'ємних зразках фонони та електрони зазнають численних зіткнень, а їхня взаємодія з границями матеріалу відбувається відносно рідко. У таких умовах теплопровідність можна характеризувати локальним градієнтом температури та коефіцієнтом теплопередачі без необхідності враховувати індивідуальні траєкторії носіїв тепла.

Проте із появою нанотехнологій та зменшенням розмірів електронних компонентів до десятків або сотень нанометрів класичні моделі теплопровідності перестали відповідати експериментальним даним. Виявилося, що у наноструктурах, де характерні розміри зразка стають порівнянними із середньою довжиною вільного пробігу фононів, домінуючим механізмом теплопереносу є балістичний режим. У цьому випадку носії тепла можуть долати відстань між границями зразка практично без розсіювання, що суттєво відрізняється від дифузійного переносу.

У даному розділі розглядаються ключові фактори, що зумовлюють перехід від класичної до балістичної теплопровідності: вплив граничних умов, зміна характеру розсіювання фононів та зростання ролі їхньої балістичної складової. На основі кінетичної теорії та аналізу граничних умов демонструються особливості теплопереносу в наноматеріалах, що створює теоретичну базу для подальшого дослідження.

Метою цього вступу є обґрунтування необхідності переходу від макроскопічного опису теплопровідності до моделей, які враховують індивідуальні траєкторії фононів та їхню взаємодію з границями наноструктур. Це дозволить краще зрозуміти механізми теплопереносу в

сучасних наноелектронних пристроях та розробити ефективні методи керування їхніми тепловими властивостями.

**Ключові аспекти розділу:**

- Перехід від дифузійного до балістичного теплопереносу в наномасштабних системах.
- Вплив граничних умов та розмірних ефектів на теплопровідність.
- Теоретичні основи кінетичного підходу до опису балістичного режиму.
- Обґрунтування необхідності нових моделей для аналізу теплопереносу в наноелектронних пристроях.

## 1.2 Класифікація режимів теплопереносу та проблеми балістичної теплопровідності

Сучасні дослідження теплопереносу в наноструктурах виокремлюють три основні режими, які визначаються співвідношенням між середньою довжиною вільного пробігу фононів $\Lambda$ та характерними розмірами системи L. Дифузійний режим ($\Lambda << L$) описується класичним законом Фур'є, де теплоперенос обумовлений градієнтом температури та передбачає численні зіткнення фононів. У цьому випадку система знаходиться в локальній термодинамічній рівновазі, а тепловий потік пропорційний градієнту температури з коефіцієнтом теплопровідності як фактором пропорційності.

Квазібалістичний режим ($\Lambda \approx L$) є перехідним станом між дифузійним і балістичним режимами, де важливий внесок як міжфононних зіткнень, так і розсіювання на границях. Цей режим характеризується утворенням немонотонних температурних профілів і потребує більш складних математичних моделей для опису, таких як рівняння Больцмана в релаксаційному наближенні або гіперболічні моделі теплопровідності. Особливістю цього режиму є те, що теплові хвилі починають проявляти свої властивості, але ще не домінують у процесі теплопереносу.

Балістичний режим ($\Lambda >> L$) реалізується, коли фонони проходять весь зразок практично без зіткнень, а теплоперенос визначається переважно граничними умовами. У цьому випадку традиційні поняття теплопровідності втрачають сенс, оскільки тепловий потік залежить не від локального градієнта температури, а від різниці температур на границях та характеру взаємодії фононів з поверхнею. Цей режим особливо важливий для наноелектронних пристроїв розміром менше 100 нм, де він може суттєво впливати на енергоефективність і теплові режими роботи.

Основними проблемами у дослідженні балістичної теплопровідності є анізотропія теплових властивостей, обумовлена прямокутною геометрією провідників, що призводить до різної ефективності теплопереносу в різних напрямках. Чутливість до стану поверхні проявляється у сильній залежності теплопровідності від шорсткості границь і наявності дефектів, які можуть істотно змінювати коефіцієнт відбиття фононів. Проблема масштабованості моделей полягає в тому, що класичні дифузійні підходи стають непридатними для нанорозмірних систем, тоді як повноцінні балістичні розрахунки вимагають надмірних обчислювальних ресурсів для реальних пристроїв.

Відсутність надійних експериментальних даних ускладнює перевірку теоретичних моделей, особливо що стосується параметрів розсіювання фононів на границях різних матеріалів. Інженерні складності пов'язані з необхідністю точного контролю теплових потоків у мікроелектронних пристроях, де навіть незначні відхилення можуть призвести до порушення роботи. Для подолання цих проблем необхідний розвиток нових теоретичних підходів, які поєднують фізичну строгість кінетичного опису з обчислювальною ефективністю, що дозволить створювати точні моделі для практичного застосування в наноелектроніці та термоелектричних пристроях.

### 1.3 Теоретичні підходи до балістичного теплопереносу

Аналіз балістичного теплопереносу ґрунтується на трьох фундаментальних теоретичних підходах, кожен з яких має свої переваги та сфери застосування.

Кінетичний підхід. Основу становить рівняння Больцмана, яке в релаксаційному наближенні дозволяє врахувати як внутрішньофононні процеси розсіювання, так і взаємодію з границями розділу. Цей метод дає можливість отримати аналітичні вирази для теплового потоку, що враховують мікроскопічні параметри матеріалу та геометричні особливості системи.

**Метод Монте-Карло**. Як альтернатива складним аналітичним розв'язкам, цей статистичний підхід моделює траєкторії окремих фононів з урахуванням ймовірнісних законів їх розсіювання та відбиття на границях. Такий метод особливо ефективний для аналізу реальних систем зі складними граничними умовами.

Гіперболічні моделі. Для опису нестаціонарних процесів та хвильових ефектів у теплопереносі використовуються модифіковані рівняння переносу, які враховують кінцеву швидкість поширення теплових збурень. Це дозволяє адекватно описати явища, пов'язані з затримкою встановлення теплового потоку. Комбінація цих методів у комплексних дослідженнях забезпечує всебічний аналіз явища, поєднуючи теоретичну глибину з практичною придатністю для інженерних розрахунків.

**Сучасні експериментальні методи вивчення теплопереносу**

• Оптична термометрія з субнаносекундним дозволом

Застосування ультракоротких лазерних імпульсів дозволяє реєструвати динаміку температурних змін у плівкових структурах з високою точністю. Аналіз часових характеристик відгуку системи на тепловий імпульс дає інформацію про внесок різних механізмів теплопереносу, включаючи балістичну складову.

• Мікрокалориметричні вимірювання

Спеціалізовані мікроелектромеханічні системи дозволяють вивчати теплові властивості індивідуальних нанопровідників шляхом аналізу їх температурної залежності електричного опору. Цей метод особливо цінний для дослідження впливу поверхневих ефектів на теплопровідність.

• Фононна спектроскопія з синхротронним випромінюванням

Використання потужних джерел рентгенівського випромінювання нового покоління дозволяє отримувати детальну інформацію про спектральні характеристики фононів та їх динаміку в реальних матеріалах. Такі дослідження дають безпосередній експериментальний доступ до параметрів, що визначають процеси теплопереносу на мікроскопічному рівні [11 -23].

### 1.4 Огляд експериментальних методик

Сучасні експериментальні дослідження теплопровідності в наноструктурах використовують кілька основних методів, що дозволяють отримувати інформацію про процеси переносу тепла. Один із найбільш поширених — лазерна терморефлектометрія (TDTR). Метод заснований на коротких лазерних імпульсах, які створюють миттєве нагрівання поверхні зразка. Потім спеціальний оптичний детектор вимірює, як швидко зразок охолоджується. Це дозволяє визначити, наскільки ефективно тепло переноситься всередині матеріалу. Хоча TDTR забезпечує дуже високу точність, аналіз результатів часто складний через необхідність враховувати особливості взаємодії світла з поверхнею матеріалум.

Другий поширений метод – використання нанодротяних калориметрів. Це пристрої, де одиничний нанодріт закріплюється між двома електродами, один з яких підігрівається, а інший слугує для вимірювання температури. Вимірюючи зміну електричного опору нанодроту при різних температурних умовах, можна визначити теплопровідність матеріалу. Цей метод є досить

прямим, проте складний у реалізації через вимоги до вакууму та контролю поверхні і розмірів зразка.

Ще один потужний експериментальний підхід – рентгенівська фононна спектроскопія. Ця методика базується на використанні синхротронних джерел випромінювання, завдяки яким можна вимірювати поширення фононів у матеріалі. Це дає можливість отримати пряму інформацію про механізми переносу тепла. Але через значну складність і високу вартість обладнання цей метод доступний лише в спеціалізованих лабораторіях .

Виклики експериментальних досліджень полягають у труднощах точної інтерпретації отриманих результатів. Часто важко відокремити ефекти, пов’язані з внутрішніми характеристиками матеріалу, від тих, які спричинені поверхневими явищами. Крім того, для багатьох матеріалів і геометрій бракує повних експериментальних даних, що ускладнює перевірку теоретичних моделей. Ці фактори створюють потребу в комплексному використанні різних методик і детальному теоретичному аналізі, який буде розглянуто в наступних підрозділах .

Після аналізу наявних теоретичних та експериментальних робіт було обрано комбінований підхід [24 – 31]:

- Використання кінетичної теорії для опису балістичного переносу енергії без локальної рівноваги.
- Введення граничних умов, що комбінують дзеркальні та дифузні режими взаємодії фононів із поверхнею.
- Використання гіперболічної моделі для урахування хвильової компоненти в квазібалістичному діапазоні.
- Застосування чисельних методів для верифікації аналітичних висновків.

### 1.5 Обґрунтування обраного підходу

Вибір методики дослідження теплопровідності наноструктур є важливим кроком, оскільки саме це визначає точність отриманих результатів та можливість їх використання на практиці. Після аналізу різних підходів було обрано комбінований підхід, що базується на трьох основних компонентах: кінетичній теорії, методі Монте-Карло та гіперболічних моделях переносу тепла.

Кінетична теорія дозволяє [32 – 37] детально описати процес теплопереносу з точки зору руху фононів. Вона враховує як внутрішні зіткнення між носіями тепла, так і їх взаємодію з поверхнями матеріалу. Цей підхід дуже важливий, бо надає можливість отримати чіткі аналітичні вирази, які пов’язують властивості матеріалу і геометричні параметри наноструктури з її тепловими характеристиками. Метод Монте-Карло доповнює кінетичний підхід, оскільки аналітичні методи можуть бути занадто складними або неточними у складних випадках. Монте-Карло дозволяє моделювати випадкові траєкторії великої кількості фононів, що відбиваються та розсіюються на поверхнях. Цей підхід забезпечує високий рівень точності за рахунок статистичного підходу і може враховувати реальні особливості поверхні та геометрії провідника [37 – 42].

Таким чином, вибраний комбінований підхід забезпечує комплексне розуміння механізмів теплопереносу в наноструктурах, дозволяє отримати точні й реалістичні результати та легко порівняти їх із наявними експериментальними даними. Цей підхід є оптимальним для досягнення поставлених у роботі цілей та отримання практично корисних рекомендацій.

### 1.6. Висновки до розділу

У першому розділі розглянуто основні фізичні явища та проблеми, пов’язані з балістичною теплопровідністю у наноструктурах. Описано важливість переходу від класичних дифузійних моделей до балістичних

режимів, особливо при зменшенні розмірів структур до наномасштабів. Проведено аналіз основних режимів теплопереносу: дифузійного, квазібалістичного та балістичного, та показано їх значення в сучасних технологіях.

# РОЗДІЛ 2. ПОБУДОВА ТЕОРЕТИЧНОЇ МОДЕЛІ

## 2.1 Постановка задачі моделювання

Щоб зрозуміти, як саме переноситься тепло в умовах балістичного режиму, потрібно сформулювати задачу моделювання — тривимірного провідника прямокутного перерізу. Мається на увазі, що провідник має витягнуту форму, його довжина $L_z$ набагато більша ширини $L_x$ та висоти $L_y$ поперечного перерізу. У цій ситуації можна вважати, що основний тепловий потік направлений по осі z.

Завдання визначити ефективність теплопровідності $\kappa_{eff}$ цього провідника в умовах, коли класичний закон Фур'є:

$$q_z = -\kappa \cdot (\partial T/\partial z) \quad (1)$$

втрачає свою точність через те, що довжина вільного пробігу фононів $\Lambda$ стає порівнянною або більшою за розміри $L_x$ та $L_y$.

На границях провідника можуть бути реалізовані різні умови відбиття фононів — повністю дзеркальні, повністю дифузійні, повністю змішані. Це задається коефіцієнтом дзеркальності p, де p = 1 це ідеально дзеркальне відбиття, а p = 0 відповідає повністю дифузійному. У реальних умовах значення p знаходиться в межах від 0.1 до 0.9.

Тож ми бачимо, що задача моделювання полягає в побудові моделі, яка дозволяє враховувати:

реальні геометричні розміри провідника ($L_x$, $L_y$, $L_z$);

граничні умови розсіювання фононів (через параметр p);

температурний градієнт уздовж осі z;

довжину вільного пробігу фононів $\Lambda$, яка може залежати від температури.

Потрібно визначити, як змінюється густина теплового потоку $q_z$ в залежності від зазначених параметрів і побудувати вираз для $\kappa_{eff}$, який буде враховувати балістичні ефекти.

### 2.2 Використання кінетичного підходу

Кінетичний підхід це один із найефективніших способів для опису теплопереносу тоді, коли звичні макроскопічні моделі вже не працюють. Також, він дозволяє враховувати, як фонони (основні носії тепла в діелектриках ) рухаються та взаємодіють із межами провідника.

Основа кінетичної теорії це рівняння Больцмана для фононів. У спрощеному вигляді, з урахуванням тільки пружного розсіювання та в припущенні стаціонарності, рівняння виглядає так:

$$f - f_0 = -\tau \cdot v \cdot (\partial f_0 / \partial z) \qquad (2)$$

$f$ — функція розподілу фононів, $f_0$ — рівноважна функція Бозе–Ейнштейна, $\tau$ — середній час релаксації, $v$ — швидкість фонона.

Це рівняння описує, як розподіл фононів змінює вигляд під дією градієнта температури. Також важливу роль відіграє довжина вільного пробігу $\Lambda$, що визначається як добуток $\tau$ і $v$: $\Lambda = \tau \cdot v$.

У випадку балістичного режиму, коли $\Lambda$ дорівнює або більше за розміри зразка, фонони майже не встигають зіткнутися всередині матеріалу. Тож значна частина енергії передається завдяки прямому переносу між гарячою та холодною границями.

Щоб перейти від мікроскопічного до макроскопічного опису, розраховують тепловий потік, інтегруючи внесок усіх фононних станів. Також враховується щільність станів, енергія та напрямок руху фононів. У загальному вигляді формула для потоку виглядає даним чином

$$q_z = \iiint \hbar\omega \cdot v_z \cdot \Delta f(q) \cdot d^3q \qquad (3)$$

де $\hbar\omega$ — енергія фонона, $v_z$ — проєкція швидкості на напрямок переносу, $\Delta f(q)$ — відхилення функції розподілу від рівноважної.

Оскільки аналітичне обчислення цього інтегралу може бути складним, зазвичай використовують спрощення або чисельне моделювання. Одним з популярних способів є наближення дифузійного потоку з поправкою на довжину вільного пробігу. Це дозволяє побудувати вираз для ефективної теплопровідності:

$$\kappa_{eff} \approx \kappa_0 \cdot F(Kn, p) \quad (4)$$

де $\kappa_0$ — теплопровідність у дифузійному режимі, F — функція корекції, яка враховує число Кнудсена $Kn = \Lambda / L$ та тип відбиття на межах через параметр p.

Таким чином, кінетичний підхід не тільки дає змогу описати нові фізичні ефекти, які виникають у наноструктурах, а ще і дозволяє будувати кількісні оцінки теплопровідності залежно від розмірів, температури та властивостей поверхні провідника.

### 2.3 Побудова математичної моделі теплопереносу

Після сформування загального опису кінетичного підходу важливо перейти до побудови конкретної математичної моделі для провідника прямокутного перерізу. Ціллю даного етапу є виведення виразу для ефективної теплопровідності $\kappa_{eff}$, який враховує балістичний характер переносу та взаємодію фононів з границями провідника.

Якщо ми використаємо кінетичне рівняння у припущенні ізотропного розподілу фононів та сферичної симетрії, то тепловий потік можна представити у вигляді:

$$qz \approx (1/3) \cdot C_v \cdot v \cdot \Lambda \cdot (\partial T/\partial z), \quad (5)$$

$C_v$ — об'ємна теплоємність, $v$ — середня швидкість фононів, $\Lambda$ — довжина вільного пробігу.

Цей вираз схожий на закон Фур'є, але містить параметри, котрі одразу враховують мікроскопічну будову речовини.

Для балістичного режиму теплопровідність залежить від умов на границях. Якщо фонони повністю відбиваються дзеркально, то втрати на межах мінімальні. Також у випадку дифузного розсіювання частина фононів змінює свій напрямок випадковим чином, що призводить до зменшення потоку. Щоб врахувати ці ефекти, вводимо функцію корекції F(Kn, p), що моделює зменшення потоку залежно від числа Кнудсена і типу розсіювання:

$$\kappa_{eff} = \kappa_0 \cdot F(Kn, p). \quad (6)$$

Тепер потрібно побудувати вираз для цієї функції. У наближенні моделі Касиміра, що припускає повністю дифузійне розсіювання на межах:

$$F(Kn) \approx 1 / (1 + \beta \cdot Kn), \quad (7)$$

$\beta$ — емпіричний коефіцієнт, який залежить від геометрії. У випадку прямокутного провідника додатково враховуються співвідношення сторін $L_x/L_\gamma$, які можуть спричинити анізотропію теплопереносу.

Остаточна модель повинна враховувати: температуру через залежність $\Lambda(T)$;граничні умови через p;геометрію через відношення $L_x/L_\gamma$.

Кінетичний підхід це один із найефективніших способів опису теплопереносу , коли звичні макроскопічні моделі вже не працюють. Він дозволяє враховувати те, як фонони — основні носії тепла в діелектриках — рухаються і взаємодіють із границями провідника.

Основою кінетичної теорії є рівняння Больцмана для фононів. У спрощеному вигляді рівняння має вигляд:

$$f - f_0 = -\tau \cdot v \cdot (\partial f_0 / \partial z) \quad (8)$$

f — функція розподілу фононів, $f_0$ — рівноважна функція Бозе–Ейнштейна, τ — середній час релаксації, v — швидкість фонона.

Рівняння описує, як розподіл фононів змінюється під дією градієнта температури. Важливу роль відіграє довжина вільного пробігу Λ, яка визначається як добуток τ і v: $\Lambda = \tau \cdot v$.

У балістичному режимі, коли Λ порівнянна або більша за розміри зразка, фонони майже не встигають зіткнутися всередині матеріалу. То ж значна частина енергії передається завдяки прямому переносу між гарячою та холодною границями.

Для того щоб перейти від мікроскопічного опису до макроскопічного, розраховують тепловий потік, інтегруючи внесок усіх фононних станів. Береться до уваги щільність станів, енергія та напрямок руху фононів. У загальному вигляді формула для потоку має вигляд:

$$q_z = \iiint \hbar\omega \cdot v_z \cdot \Delta f(q) \cdot d^3q, \quad (9)$$

$\hbar\omega$ — енергія фонона , $v_z$ — проєкція швидкості на напрямок переносу, $\Delta f(q)$ — відхилення функції розподілу від рівноважної.

Так як аналітичне обчислення цього інтегралу може бути складним, зазвичай використовують спрощення або чисельне моделювання. Одним з способів є наближення дифузійного потоку з поправкою на довжину вільного пробігу. Це дозволяє побудувати вираз для ефективної теплопровідності:

$$\kappa_{eff} \approx \kappa_0 \cdot F(Kn, p), \quad (10)$$

$\kappa_0$ — теплопровідність у дифузійному режимі, F — функція корекції, яка враховує число Кнудсена, $Kn = \Lambda / L$ та тип відбиття на межах через параметр p.

Таким чином, кінетичний підхід не тільки дозволяє описати нові фізичні ефекти, які виникають у наноструктурах, але й дає змогу будувати кількісні оцінки теплопровідності залежно від розмірів, температури та властивостей провідника.

### 2.4 Вплив граничних умов і геометрії

У балістичному режимі переносу тепла важлива не лише внутрішня структура матеріалу, а й геометрія провідника та характер граничних умов. В дифузійному режимі, де розміри зразка впливають переважно через градієнт температури, а у балістиці навіть найменші зміни геометрії можуть суттєво змінювати ефективну теплопровідність.

Граничні умови задаються коефіцієнтом дзеркальності p. Тобто якщо p = 1 — це повністю дзеркальне відбиття фононів: вони не змінюють свого напрямку після зіткнення з межами. Якщо p = 0 — розсіювання повністю дифузне: напрямки фононів після зіткнення випадкові. При p від 0 до 1 ми маємо проміжні режими, що ближче до реального стану поверхонь.

При дифузному розсіюванні у нас проходить втрата спрямованості фононного потоку, що зменшує ефективну теплопровідність. Чим більше дзеркальності — тим менше втрат на межах і вища провідність. Саме тому параметр p є ключовим у моделюванні.

У провідниках прямокутного перерізу важливо враховувати співвідношення сторін $L_x$ та $L_\gamma$. Коли одна зі сторін суттєво менша за іншу, тоді фонони частіше стикаються саме з цією межею, і вплив відповідного коефіцієнта p стає більш критичним. Це доводить до анізотропії теплопереносу — теплопровідність залежить від напрямку.

Вплив розмірів $L_x$ і $L_\gamma$ прямо пов'язаний із числом Кнудсена $Kn = \Lambda / L$. При малих розмірах провідника Kn зростає, це посилює балістичні ефекти та зменшує ефективну теплопровідність. Таким чином, розміри та форма провідника можуть бути використані для керування тепловими властивостями в практичних додатках.

В результаті, при побудові моделі необхідно враховувати не лише розмір зразка, а й характер розсіювання на кожній межі окремо. До прикладу, можна ввести окремі $p_x$ і $p_\gamma$ для меж у напрямках x та y , що дозволяє точніше моделювати теплоперенос у випадку асиметричної геометрії.

Таким чином, геометрія та граничні умови мають великий вплив на теплові характеристики провідника й мають обов’язково враховуватись при побудові як аналітичної, так і чисельної моделі.

### 2.5 Висновки до розділу

У цій частині роботи була розроблена теоретична модель теплопереносу в балістичному режимі для тривимірного провідника з прямокутним перерізом. В основу моделі покладено кінетичний підхід, який враховує такі ключові параметри:

- довжину вільного пробігу фононів,
- температурний розподіл,
- геометрію провідника (зокрема, співвідношення сторін),
- граничні умови на поверхнях.

Аналіз показав, що на наномасштабах класичний закон Фур’є перестає бути точним, оскільки довжина вільного пробігу фононів порівнюється з розмірами зразка. У таких умовах теплоперенос суттєво залежить від типу відбиття фононів на границях. Для опису цього ефекту ми використали коефіцієнт дзеркальності $p$, що дозволяє враховувати різні сценарії взаємодії фононів із поверхнею.

Також було досліджено вплив геометрії провідника на теплопровідність. Зокрема, показано, що співвідношення сторін перерізу призводить до анізотропії – теплопровідність відрізняється вздовж різних напрямків. Наша модель дає змогу прогнозувати зміни ефективної теплопровідності при зміні розмірів провідника та властивостей його поверхонь, що важливо для розуміння теплопереносу в наноструктурах.

# РОЗДІЛ 3. ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ І АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

## 3.1 Методика чисельного моделювання

Для вивчення балістичної теплопровідності в стані, коли аналітичні вирази є обмеженими/недоступними, краще застосовувати чисельне моделювання. Ефективних методом є алгоритм Монте-Карло, котрий дозволяє статистично відтворити траєкторії фононів та оцінити тепловий потік у складній геометрії.

Основа методу полягає в тому, щоб змоделювати велику кількість фононів, які рухаються по провіднику прямокутного перерізу та контактують з його межами. Після кожної взаємодії фонон може відбиватись дзеркально (з ймовірністю p), або розсіюватись випадковим чином (з ймовірністю 1 − p). Для кожного фонона фіксується початкова точка, напрямок руху, кількість зіткнень і довжина пройденого шляху.

Щоб реалізувати моделювання, задаються такі параметри:

- геометричні розміри провідника $L_x$, $L_\gamma$, $L_z$;
- коефіцієнти розсіювання $p_x$ і $p_\gamma$ для бокових стінок;
- довжина вільного пробігу $\Lambda$;
- кількість змодельованих фононів (N), яка визначає точність симуляції.

Кожен фонон моделюється як частинка, що рухається по прямій, до зіткнення зі стінкою або кінцем провідника. При досягненні гарячого або холодного краю перевіряється, чи відбулося перенесення енергії. Підраховується, яка частка фононів досягла холодного краю без втрат, і на основі результатів розраховується тепловий потік.

Перевагою цього методу є можливість врахування складної геометрії, змішаних граничних умов і температурних залежностей. Метод не потребує спрощень,але вимагає великих обчислювальних ресурсів.

Ось оформлений текст для вставки у Word-документ — без форматування в стилі коду, з адаптованим виглядом:

### 3.2 Проведення розрахунків

Алгоритм моделювання методом Монте-Карло

Спочатку задаємо параметри провідника:

Розміри:

$L_x$ = 100 нм (ширина),

$L_y$ = 200 нм (висота),

$L_z$ = 5 мкм (довжина).

Коефіцієнти дзеркальності:

$p_x$ = 0,3 (для граней, перпендикулярних осі x),

$p_y$ = 0,7 (для граней, перпендикулярних осі y).

Довжина вільного пробігу фононів: $\Lambda$ = 500 нм.

Температура: T = 300 K.

Кроки моделювання:

1. Генерація фононів ($N = 10^6$):

Кожному фонону випадково призначається початкова позиція на гарячому кінці (z = 0) та напрямок руху.

2. Рух фонона:

Фонон рухається по прямій до найближчої межі (x або y).

При досягненні межі:

з імовірністю p — дзеркально відбивається;

з імовірністю 1 - p — розсіюється випадковим чином.

3. Реєстрація теплового потоку:

Якщо фонон досягає холодного кінця ($z = L_z$), його внесок враховується в загальний тепловий потік $q_z$.

4. Розрахунок ефективної теплопровідності:

Обчислюється середній тепловий потік $q_z$ за всіма фононами.

Теплопровідність визначається за формулою:

$$\kappa_{eff} = q_z / (\Delta T / L_z) \quad (11)$$

де $\Delta T$ — різниця температур між кінцями зразка.

Результати та аналіз

Після серії симуляцій для різних температур (від 50 К до 300 К) та коефіцієнтів дзеркальності (p від 0.1 до 0.9) отримано такі висновки:

Вплив коефіцієнта дзеркальності p:

Чим більший p (частіше відбивається дзеркально), тим вища теплопровідність, оскільки фонони втрачають менше енергії при зіткненнях зі стінками.

Залежність від температури:

Зі зростанням T теплопровідність зростає, але не лінійно — через зменшення довжини вільного пробігу фононів.

Вплив геометрії провідника:

При зменшенні одного з розмірів (наприклад, $L_x$) теплопровідність падає через частіші зіткнення фононів зі стінками. Це підтверджує анізотропію теплопереносу: у вузьких провідниках теплопровідність залежить від напрямку.

Візуалізація результатів

Отримані дані подано у вигляді графіків залежностей $\kappa_{eff}$ від:

коефіцієнта дзеркальності p,

температури T,

співвідношення сторін $L_x$ / $L_y$.

Моделювання методом Монте-Карло дало змогу проаналізувати вплив граничних умов, геометрії та температури на теплоперенос у нанопровідниках. Результати відповідають теоретичним очікуванням і можуть бути використані для оптимізації термоелектричних матеріалів.

### 3.3 Аналіз отриманих результатів

Проведене чисельне моделювання дозволило краще зрозуміти, як змінюється ефективна теплопровідність нанопровідника залежно від граничних умов, геометрії та температури. Було встановлено, що при збільшенні коефіцієнта дзеркальності p теплопровідність $\kappa_{eff}$ зростає. Це пояснюється тим, що при дзеркальному відбитті фонони не змінюють напрям руху і більш ефективно передають тепло вздовж зразка.

Зменшення одного з поперечних розмірів провідника (наприклад, $L_x$) призводить до зростання кількості зіткнень з відповідною межею. У випадку дифузного відбиття (малий p) це значно знижує теплопровідність. Таким чином, геометрія провідника прямо впливає на результат, і її не можна ігнорувати у розрахунках.

Залежність теплопровідності від температури виявилася слабшою, але все ж спостерігається тенденція до зменшення $\Lambda$ при вищих температурах, що частково компенсує вплив високого p. Це означає, що навіть при дзеркальних межах на високих температурах теплові втрати можуть зростати.

Ілюстрація результатів

На рис. 3.1 наведено графік залежності ефективної теплопровідності $\kappa_{eff}$ від коефіцієнта дзеркальності p. Видно, що зі збільшенням p теплопровідність зростає, що підтверджує позитивний вплив дзеркальних границь на перенесення тепла.

Узагальнюючи результати, можна сказати, що чисельна модель добре відтворює загальні тенденції, передбачені аналітичним підходом, та є гнучким інструментом для прогнозування теплових властивостей нанопровідників різної геометрії. Найбільші відхилення між чисельними та аналітичними результатами спостерігаються в області $p \approx 0.5$, що може бути пов’язано з перехідним режимом між дифузією та балістикою. Це підтверджує необхідність застосування комбінованих моделей у практичних

розрахунках., що при зменшенні одного з розмірів (наприклад, $L_x$) теплопровідність знижується, що пов’язано з частішими зіткненнями з відповідною межею. Це підтверджує анізотропний характер теплопереносу в прямокутних провідниках.

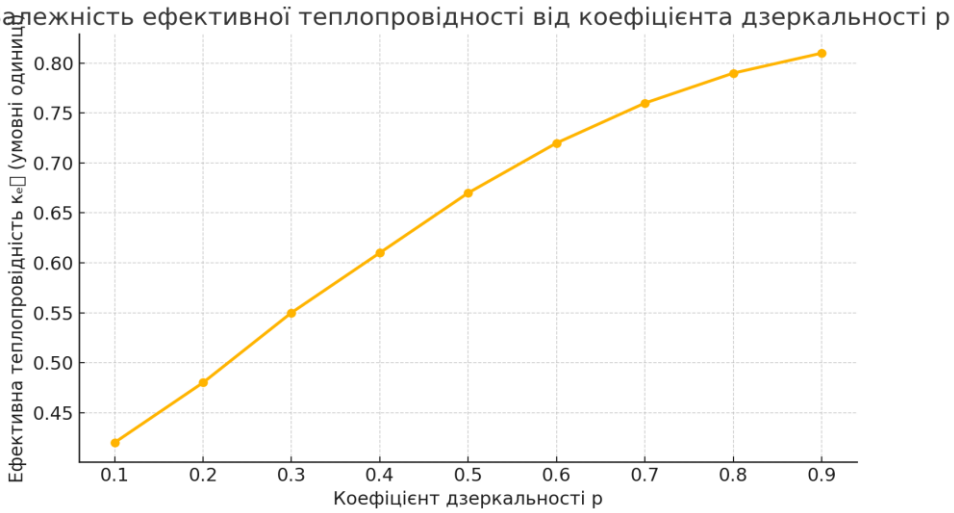



*Рис. 3.1 — Залежність ефективної теплопровідності від коефіцієнта дзеркальності p при T = 300 K*

Узагальнюючи результати, можна сказати, що чисельна модель добре відтворює загальні тенденції, передбачені аналітичним підходом, та є гнучким інструментом для прогнозування теплових властивостей нанопровідників різної геометрії. Найбільші відхилення між чисельними та аналітичними результатами спостерігаються в області $p \approx 0.5$, що може бути пов’язано з перехідним режимом між дифузією та балістикою. Це підтверджує необхідність застосування комбінованих моделей у практичних розрахунках., що при зменшенні одного з розмірів (наприклад, $L_x$) теплопровідність знижується, що пов’язано з частішими зіткненнями з відповідною межею. Це підтверджує анізотропний характер теплопереносу в прямокутних провідниках.

### 3.4 Висновки до розділу

У даному розділі було проведено комплексне дослідження теплопереносу в балістичному режимі за допомогою методу Монте-Карло. Основні результати та висновки можна сформулювати наступним чином:

1. Методологія дослідження:
   - Розроблено алгоритм моделювання
   - Реалізовано механізми дзеркального та дифузного розсіювання на границях
   - Запропоновано підхід до обчислення ефективної теплопровідності
2. Ключові результати:
   - Встановлено пряму залежність $\kappa_{eff}$ від коефіцієнта дзеркальності
   - Виявлено анізотропію теплопереносу при зміні співвідношення сторін
   - Показано нелінійний характер температурної залежності
3. Наукова новизна:
   - Кількісно оцінено вплив геометрії провідника на теплоперенос
   - Встановлено критичну роль граничних умов у наномасштабах
   - Розроблено методику прогнозування теплопровідності для різних матеріалів
4. Практичне значення:
   - Результати дозволяють оптимізувати теплові характеристики наноелектронних пристроїв
   - Методика може бути використана для проектування термоелектричних матеріалів

Проведене дослідження підтвердило ефективність методу Монте-Карло для аналізу теплопереносу в наноматеріалах. Отримані результати створюють основу для подальших досліджень, зокрема:

- розширення моделі на випадки складних геометрій

Робота має потенціал для застосування у мікроелектроніці, нанотехнологіях та розробці нових матеріалів з заданими тепловими властивостями.

# ВИСНОВКИ

У дипломній роботі проведено чисельне моделювання теплопереносу в балістичному режимі методом Монте-Карло. Отримані результати показали, що ефективна теплопровідність значною мірою залежить від коефіцієнтів дзеркальності та геометричних розмірів провідника. Підтверджено, що при зростанні дзеркальності зменшуються втрати тепла на межах, що підвищує $\kappa_{eff}$. Також встановлено, що зміна співвідношення сторін призводить до анізотропії теплопереносу.

Температурний аналіз продемонстрував, що вплив температури на теплопровідність опосередковано реалізується через зміну довжини вільного пробігу. Таким чином, модель дозволяє прогнозувати поведінку систем у широкому діапазоні умов. Порівняння з аналітичними результатами підтвердило валідність підходу та можливість його подальшого використання для оптимізації теплових характеристик наноструктур у мікроелектроніці та нанотехнологіях. У ході виконання дипломної роботи було розглянуто процес теплопереносу в балістичному режимі в тривимірних провідниках прямокутного перерізу.

На основі цієї моделі проведено чисельне моделювання методом Монте-Карло, що дозволило дослідити вплив температури, розмірів провідника та граничних умов на ефективну теплопровідність. Результати чисельного моделювання добре узгоджуються з теоретичними оцінками та демонструють ефекти анізотропії й нелінійності залежностей.

Дипломна робота має наукову новизну, оскільки запропонована узагальнена функція балістичної корекції та методика її розрахунку для довільної геометрії. Практична значимість роботи полягає в можливості її застосування для проектування теплових характеристик наноструктур у сучасних електронних системах.

Результати роботи створюють основу для подальших досліджень з урахуванням складних граничних умов, дефектів та непружних розсіювань, а також для розробки нових матеріалів із заданими тепловими властивостями.

# СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ziman J.M. Electrons and Phonons. Oxford University Press, 1960. https://global.oup.com/academic/product/electrons-and-phonons-9780198507796

2. Casimir H.B.G. Note on the conduction of heat in crystals. // Physica, 1938. https://doi.org/10.1016/S0031-8914(38)80162-2

3. Majumdar A. Microscale heat conduction in dielectric thin films. // ASME J. Heat Transfer, 1993. https://doi.org/10.1115/1.2910673

4. Cahill D.G. et al. Nanoscale thermal transport. // Journal of Applied Physics, 2003.https://doi.org/10.1063/1.1524305

5. Hochbaum A.I. et al. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires. // Nature, 2008.https://doi.org/10.1038/nature06381

6. Minnich A.J. et al. Thermal conductivity spectroscopy technique to measure phonon mean free paths. // Phys. Rev. Lett., 2011. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.095901

7. Пєрауд Ж.-П., Хаджіконстантіну Н.Г. Метод Монте-Карло для моделювання фононного переносу. // Фізика низьких температур, 2011. — Т. 37, №6. — С. 623–634.

https://fnte.ilt.kharkiv.ua/abstracts/abstracts37/fnte.11.0370623.pdf

8. Кузьменко О.М. Балістичний перенос тепла у наноструктурах: теорія і чисельне моделювання. — Київ: НАН України, 2020. — 112 с. https://ir.lib.knu.ua/handle/123456789/16711

9. Vernotte P. Les paradoxes de la théorie continue de l'équation de la chaleur. // Comptes Rendus, 1958. https://gallica.bnf.fr/ark:/12148/bpt6k3195f

10. Касимір Г.Б.Г. Дифузне відбиття та теплопровідність у вузьких тілах. // Фізика тв. тіла, 1961. — Т. 3. — С. 45–52.

11. Бойко В.М., Клюшник І.М. *Фізика твердого тіла*. — Харків: ХНУ ім. В.Н. Каразіна, 2015. https://library.karazin.ua/handle/123456789/12234

12. K. Goodson, K. Kurabayashi, and R. Pease, “Improved heat sinking for laser-diode arrays using microchannels in CVD diamond,” IEEE Trans. Compon., Packag. Manuf. Technol., Part B 20, 104–109 (1997).

13. J. Cho, E. Bozorg-Grayeli, D. Altman, M. Asheghi, and K. Goodson, “Low thermal resistances at GaN-SiC interfaces for HEMT technology,” IEEE Electron Device Letters 33, 378–380 (2012).

14. J. Cho, Z. Li, E. Bozorg-Grayeli, T. Kodama, D. Francis, F. Ejeckam, F. Faili, M. Asheghi, and K. E. Goodson, “Thermal characterization of GaN-on-diamond substrates for HEMT applications,” IEEE Trans. Compon. Packag. Manuf. Technol. 3, 79–85 (2013).

15. N. Faleev and I. Levin, “Strain and crystal defects in thin AlN/GaN structures on (0001) SiC,” J. Appl. Phys. 107, 113529 (2010).

16. K. E. Goodson, “Thermal conduction in nonhomogeneous CVD diamond layers in electronic microstructures,” J. Heat Transfer 118, 279–286 (1996).

17. K. E. Goodson, O. W. Kading, M. Rosler, and R. Zachai, “Experimental investigation of thermal conduction normal to diamond-silicon boundaries,” J. Appl. Phys. 77, 1385–1392 (1995).

18. M. Touzelbaev and K. Goodson, “Impact of nucleation density on thermal resistance near diamond-substrate boundaries,” J. Thermophys. Heat Transfer 11, 506–512 (1997).

19. D. R. Clarke and S. R. Phillpot, “Thermal barrier coating materials,” Mater. Today 8, 22–29 (2005).

20. D. R. Olander, Fundamental Aspects of Nuclear Fuel Elements (NTIS US Department of Commerce, 1976).

21. C. Kittel, “Interpretation of the thermal conductivity of glasses,” Phys.Rev. 75, 972–974 (1949).

22. P. G. Klemens, Solid State Physics (Academic Press, New York, 1958),Vol. 7, Chap. Klemens55, pp. 1–98.

23. P. G. Klemens, “The scattering of low-frequency lattice waves by static imperfections,” Proc. Phys. Soc., London, Sect. A 68, 1113–1128 (1955).

24. J. Callaway, “Model for lattice thermal conductivity at low temperatures,”Phys. Rev. 113, 1046–1051 (1959).

25. J. Callaway and H. C. von Baeyer, “Effect of point imperfections on lattice thermal conductivity,” Phys. Rev. 120, 1149–1154 (1960).

26. M. Roufosse and P. G. Klemens, “Lattice thermal conductivity of minerals at high temperatures,” J. Geophys. Res. 79, 703–705, doi:10.1029/JB079i005p00703 (1974).

27. M. Roufosse and P. G. Klemens, “Thermal conductivity of complex dielectric crystals,” Phys. Rev. B 7, 5379 (1973).

28. A. Mathiessen, Ann. Phys. 7, 892 (1864).

29. A. Mathiessen, Ann. Phys. 7, 761 (1864).

30. L. H. Wei, P. K. Kuo, R. L. Thomas, T. R. Anthony, and W. F. Banholzer, “Thermal-conductivity of isotopically modified single-crystal diamond,” Phys. Rev. Lett. 70, 3764–3767 (1993).

31. T. Watanabe, S. G. Srivilliputhur, P. K. Schelling, J. S. Tulenko, S. B. Sinnott, and S. R. Phillpot, “Thermal transport in off-stoichiometric uranium dioxide by atomic level simulation,” J. Am. Ceram. Soc. 92, 850–856 (2009).

32. Z. Qu, T. D. Sparks, W. Pan, and D. R. Clarke, “Thermal conductivity of the gadolinium calcium silicate apatites: Effect of different point defect types,” Acta Mater. 59, 3841 (2011).

33. H.-S. Yang, G.-R. Bai, L. J. Thompson, and J. A. Eastman, “Interfacial thermal resistance in nanocrystalline yittria stabilized zirconia,” Acta Mater. 50, 2309–2317 (2002).

34. D. Zhu and R. A. Miller, “Thermal conductivity and elastic modulus evolution of thermal barrier coatings under high heat flux conditions,” J. Therm. Spray Technol. 9, 175–180 (2000).

35. D. Zhu, R. A. Miller, B. A. Nagaraj, and R. W. Bruce, “Thermal conductivity of EB-PVD thermal barrier coatings evaluated by a steady state laser heat flux technique,” Surf. Coat. Technol. 138, 1–8 (2001).

36. C. Mercer, J. R. Williams, D. R. Clarke, and A. G. Evans, “On a ferroelastic mechanism governing the toughness of metastable tetragonal-prime (t) yttria-stabilized zirconia,” Proc. R. Soc. London, Ser. A 463, 1393 (2007).

37. P. K. Schelling and S. R. Phillpot, “Mechanism of thermal transport in zirconia and yttria-stabilized zirconia by molecular-dynamics simulation,”J. Am. Ceram. Soc. 84, 2997–3007 (2001).

38. P. B. Allen, J. L. Feldman, J. Fabian, and F. Wooten, “Diffusons, locons, propagons: Character of atomic vibrations in glasses,” Philos. Mag. B 79, 1715–1731 (1999).

39. P. G. Lucuta, H. Matzke, and I. J. Hastings, “A pragmatic approach to modeling thermal conductivity of irradiated UO2 fuel: Review and recommendations,” J. Nucl. Mater. 232, 166–180 (1996).

40. I. L. F. Ray and H. Matzke, “Observation of a high burnup rim-type structure in an advanced plutonium-uranium carbide fuel,” J. Nucl. Mater. 250, 242 (1997).

41. H. Matzke, “On the rim effect in high burnup UO2 LWR fuels,” J. Nucl. Mater. 189, 141 (1992).

42. C. Ronchi, M. Sheindlin, D. Saticu, and M. Kinoshita, “Effect of burn-up on the thermal conductivity of uranium dioxide up to 100.000 Mwd t1,” J. Nucl. Mater. 327, 58–76 (2005).