

ЦЯО ВЭНЬПЭЙ

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ
НЕМЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ**

По специальностям

1.2.2 – Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Цяо Вэньпэй

Москва – 2022

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана» (национальный исследовательский университет)

- Научный руководитель:** доктор технических наук, профессор
Хвесьюк Владимир Иванович
- Научный консультант:** доктор физико-математических наук, доцент
Кузенов Виктор Витальевич
- Официальные оппоненты:** **Колесников Анатолий Федорович**
доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией взаимодействия плазмы и излучения с материалами федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук»
- Кузма-Кичта Юрий Альфредович**
доктор технических наук, профессор кафедры инженерной теплофизики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «МЭИ»
- Ведущая Организация:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук»

Защита диссертации состоится «__» _____ 2022 года в __ ч. __ мин. на заседании диссертационного совета 24.2.331.05 при Московском государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана по адресу: Москва, ул. 2-ая Бауманская, д. 5, стр 1, зал Ученого совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана и на сайте www.bmstu.ru.

Автореферат разослан «__» _____ 2022 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук, доцент



Аттетков
Александр
Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Теплопроводность является одним из самых основных теплофизических свойств неметаллических материалов. Математическое моделирование для расчета теплопроводности неметаллических материалов имеет решающее значение для многих областей современной науки и техники, включая охлаждение микросхем и полупроводников, эффективное термоэлектрическое охлаждение, производство электроэнергии и новую энергетику.

Перенос тепла в неметаллических материалах осуществляется квантами упругих волн – фононами. Существенное отличие взаимодействий фононов от взаимодействий классических частиц – многопараметричность (2 типа поляризации фононов – продольный и поперечный акустический фонон, 2 типа взаимодействия – распад и слияние, 2 типа процессов – упругий и неупругий процесс), в то время как взаимодействие классических частиц зависит от одной величины – сечения взаимодействия. Детальный анализ кинетических процессов в фононном газе – сложная задача. Это связано с большим количеством параметров, от которых зависят взаимодействия фононов друг с другом.

Некоторые из наиболее широко используемых методов – это методы аппроксимации времени релаксации (RTA), методы «из первых принципов» (*ab-initio*) и методы Монте-Карло (Monte-Carlo). Метод RTA, основанный на некоторых упрощающих предположениях, дает хорошее описание теплопроводности материалов и информацию о роли примесей и дефектов в теплопереносе, но он требует использования «подгоночных» параметров и «тотального» времени, объединяющего все процессы взаимодействия вместе. Возможность предсказать теплопроводность материалов ограничена, а механизм взаимодействия между фононами неясен. Метод *ab-initio* дает хорошие результаты без использования подгоночных параметров и с учетом квантовой механики, но в модели отсутствует строгий расчёт взаимодействий фононов, использующий решения уравнений сохранения энергии и квазиимпульса. Методы Monte-Carlo

считаются полезным методом моделирования процессов теплопередачи с соответствующим балансом между точностью и вычислительной эффективностью. Однако при расчете теплопроводности методом Монте-Карло используются серьезные упрощения, а процесс взаимодействия фононов не описывается строго в существующих работах.

Различные недостатки классических методов вызывают необходимость разработки нового метода математического моделирования для расчета теплопроводности неметаллических материалов с целью более строгого учета сложных диффузионных процессов фононов и получения более полной информации о процессах, происходящих внутри фононных газов. Когда предлагается новый метод математического моделирования, для его реализации также необходимо разработать новые математические алгоритмы и новое программное обеспечение.

В связь с вышеизложенным тема диссертационной работы, посвященной исследованию методами математического моделирования диффузионных процессов фононов в двумерном и трехмерном пространстве для расчета теплопроводности неметаллических материалов, является важной и актуальной.

Целью диссертационной работы является разработка и применение физико-математических моделей, создание алгоритмов и программного обеспечения для моделирования диффузионных процессов для расчета теплопроводности неметаллических материалов с детальным учетом кинетики взаимодействия фононов.

Для достижения поставленной цели потребовалось решение **следующих основных задач:**

1. Анализ существующих математических моделей для расчета теплопроводности неметаллических материалов.

2. Разработка физико-математической модели и построение численных алгоритмов взаимодействий фононов с детальным учетом кинетики фононов в двумерном и трёхмерном приближениях.

3. Разработка программного обеспечения для математического моделирования диффузионных процессов фононов для расчета теплопроводности неметаллических материалов.

4. Расчет теплопроводности кремния и германия в широком диапазоне температур для валидации и верификации предложенного метода расчета и анализ полученных результатов.

Методы исследования. При решении задач, возникающих в процессе диссертационной работы, использовались различные методы математического моделирования и вычислительной математики: метод теории функциональной плотности (DFT), метод Монте-Карло, метод статистического анализа, метод итерации.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые научные результаты:

1. Построены вычислительные алгоритмы для моделирования диффузионных процессов фононов в двумерном и трехмерном пространстве со строгим учетом процессов взаимодействия фононов друг с другом на каждом шаге расчёта без использования подгоночных параметров и правила Маттиссена.

2. Предложены методы итерации для расчета теплопроводности неметаллических материалов в двумерном и трехмерном пространстве.

3. Создан программный комплекс для расчета теплопроводности неметаллических материалов на основе математического моделирования диффузионных процессов фононов.

Теоретическая и практическая значимость работы.

В результате выполнения диссертационной работы разработан и зарегистрирован программный комплекс, позволяющий производить моделирование диффузионных процессов фононов в двумерном и трехмерном пространстве в собственном фононом газе, определять ряд теплофизических свойств на основе моделирования диффузии фононов и представлять полученные результаты в графическом виде. (Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022660508 от 06 июня 2022г.).

Проведено сравнение данных вычислительного результата с известными экспериментальными данными и данными других авторов, подтвердившее корректность разработанных алгоритмов.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Вычислительные алгоритмы для моделирования диффузионных процессов фононов в двумерном и трехмерном пространстве со строгим учетом процессов взаимодействия фононов друг с другом на каждом шаге расчёта без использования подгоночных параметров и правила Маттиссена.

2. Методы итерации для расчета теплопроводности неметаллических материалов в двумерном и трехмерном пространстве

3. Программный комплекс для математического моделирования диффузионных процессов фононов для расчета теплопроводности неметаллических материалов.

4. Результаты расчётов диффузии и теплопроводности кремния и германия.

Достоверность и обоснованность изложенных в диссертации основных положений, результатов и выводов основывается на использовании корректных математических моделей, сравнении полученных результатов с расчётными данными, полученными при использовании других методов, экспериментальными данными, предложенными для верификации моделей.

Апробация результатов работы. Основные результаты диссертационной работы были представлены и обсуждены в докладах на следующих конференциях и симпозиумах: XV Российской конференции (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (Москва, 2018); 7-ая Российская национальная конференция по теплообмену (Москва, 2018); V International Conference on Information Technology and Nanotechnology (Самара, 2019); XXXV Сибирский теплофизический семинар (Новосибирск, 2019); XI Семинар вузов по теплофизике и энергетике (Санкт-Петербург, 2019); III международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетике» (Москва, 2020); III Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (Россия, 2021).

Публикации. Основные результаты диссертации отражены в 11 научных работах, в том числе в 1 статье в журнале, входящем в Перечень российских рецензируемых научных изданий, и 5 научных публикациях в изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Scopus и Web of Science.

Личный вклад соискателя. Все исследования, результаты которых изложены в диссертационной работе, проведены лично соискателем в процессе научной деятельности. Из совместных публикаций в диссертацию вошел лишь тот материал, который непосредственно принадлежит соискателю.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, основных выводов и заключения и списка литературы. Полный объём диссертации составляет 123 страницы, включая 64 рисунки, 18 таблиц. Список литературы включает 144 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи исследования, научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, их достоверность, основные положения, защищаемые диссертантом, а также приведены данные о структуре и объеме диссертационной работы.

В первой главе представлен аналитический обзор работ, посвященных расчету теплопроводности неметаллических материалов, дано краткое описание основных моделей, которые используются для определения теплопроводности неметаллических материалов в широком диапазоне температур, и кратко изложена суть предлагаемого метода. В выводах сформулированы цель и основные задачи исследования, изложены методы расчетов в данной работе.

Показано, что хотя метод приближения времени релаксации (RTA) для определения теплопроводности неметаллических материалов на основе транспортного уравнения Больцмана даёт хорошее согласие с экспериментом, он в принципе неприменим для описания неупругого рассеяния, и этот метод требует

некоторых подгоночных параметров и, таким образом, не обеспечивает достоверные предсказательные данные (А.С. Sparavigna, 2016).

Метод «из первых принципов» не требует эмпирических подгоночных данных. Единственными исходными данными являются сведения о строении атомных решёток и квантово-механические свойства атомов. Однако, его недостатком является то, что при учёте процессов слияния фононов нет разделения на упругие N -процессы и неупругие U -процессы, которые по-разному влияют на состояние фононного газа.

Метод Монте-Карло также используется для определения теплопроводности неметаллических материалов (К. Kukita, К. Kumakura, 2016). В этом подходе представлен оригинальный метод определения теплопроводности материалов. Вместо уравнения Больцмана используется представление теплопроводности в виде произведения теплоёмкости на коэффициент диффузии фононного газа: $k(T) = C_v(T) \cdot D(T)$, где $C_v(T)$ – теплоёмкость материала, $D(T)$ – коэффициент диффузии фононов. Тогда при известных значениях теплоёмкости определение теплопроводности сводится к изучению диффузии фононного газа. При этом взаимодействия фононов рассматриваются без использования законов сохранения, а на основе вероятностных соотношений и правила Маттиссена.

В данной работе исходным для определения коэффициента диффузии является соотношение, полученное Эйнштейном: $L^2(t) = C \cdot D \cdot t$, где t – время диффузии, L – расстояние между исходной точкой и положением объекта диффузии в момент времени t , C – константа, определяемая из расчёта. Этот подход впервые позволяет предельно подробно учитывать все типы тройных взаимодействий фононов, используя соответствующие законы сохранения энергии и квазиимпульсов.

Во второй главе кратко описан механизм фононного взаимодействия.

Взаимодействия продольных и поперечных фононов имеют вид:

$$TA + TA \leftrightarrow LA, \quad TA + LA \leftrightarrow LA.$$

Здесь LA – продольный фонон, TA – поперечный фонон.

Закон сохранения для N - и U - процессов записывается так: $\omega_1 + \omega_2 \leftrightarrow \omega_3$.

Закон сохранения квазиимпульсов для N -процессов: $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \leftrightarrow \vec{k}_3$ ($|\vec{k}_3| < k_{\max}$), закон

сохранения квазиимпульсов для U -процессов: $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 \rightarrow \vec{k}_3 + \vec{G}$ ($|\vec{k}_3| > k_{\max}$).

Здесь $|\vec{G}| = 2\pi/a$, где a – постоянная решётки.

Рассчитаны дисперсионные соотношения для кремния Si^{28} и германия Ge^{70} на основе метода теории функциональной плотности (DFT), проведено сравнение с известными экспериментальными данными (Рис. 1).

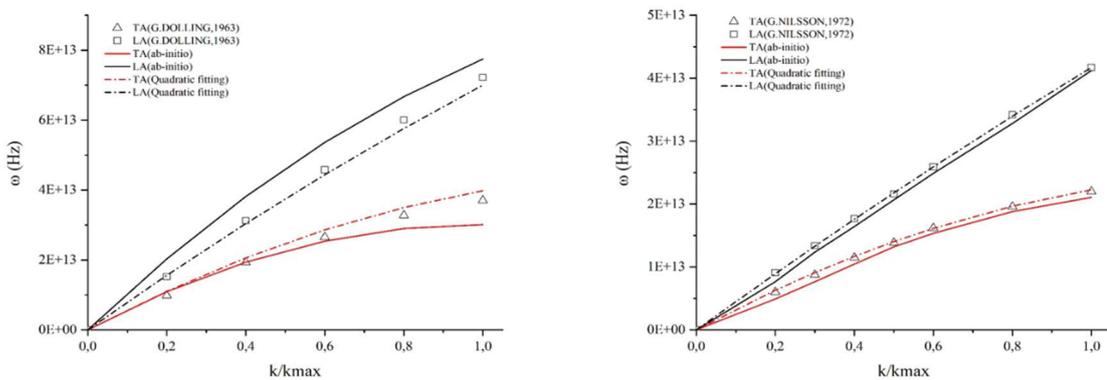


Рис. 1. Дисперсионное соотношение для кремния и германия по направлению [1 0 0]

Описан алгоритм метода Монте-Карло для моделирования процессов взаимодействия фононов в двумерном пространстве (Рис. 2).

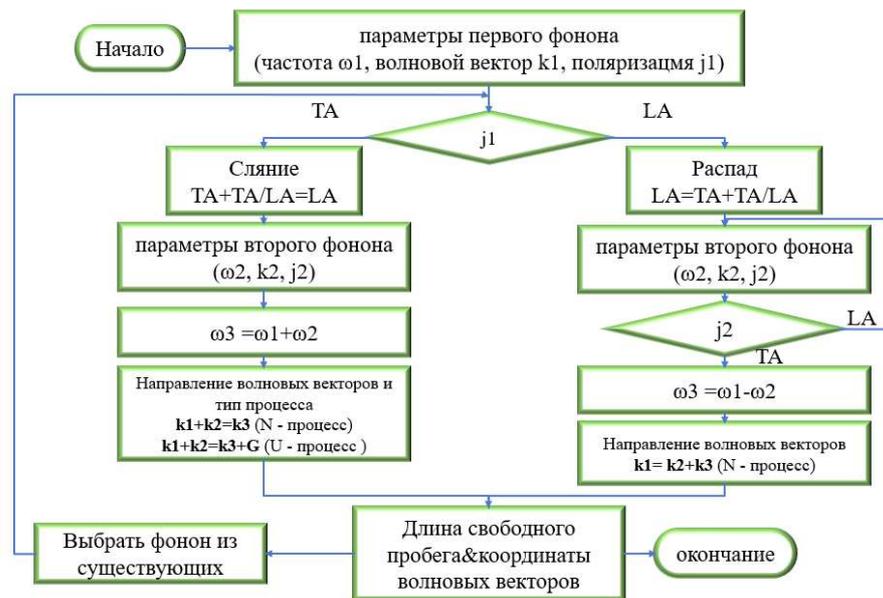


Рис. 2. Схема реализации алгоритма моделирования диффузии фононов в 2D

Математическая модель для определения параметров фононов в алгоритме моделирования диффузии фононов в 2D (Рис. 2) представлена ниже.

1) Определение частоты фонона. Интервал $[\omega_{\min}, \omega_{\max}]$ разбивается на одинаковые интервалы: $\Delta\omega = (\omega_{\max}^j - \omega_{\min}^j) / N_b^j$, где $N_b^j = 1000$. Числа фононов в интервалах частот $\Delta\omega_i$

$$N_i^L = [n(\omega_{0i}, L)]D(\omega_{0i}, L)\Delta\omega_i, \quad N_i^T = 2[n(\omega_{0i}, T)]D(\omega_{0i}, T)\Delta\omega_i,$$

где, $n(\omega_{0i}, T)$ – распределение Бозе, ω_{0i} – центральная частота интервала $\Delta\omega_i$, $D(\omega_{0i}, T)$ – плотность состояний фононов.

Нормированная кумулятивная функция плотности числа для определения частоты фонона

$$F_i^j = \frac{\sum_{k=1}^j N_k^j}{\sum_{k=1}^{k=N_b^j} N_k^j}.$$

Случайное число R ($0 \leq R \leq 1$) позволяет определить частоту ω_i^j . Если $F_{i-1}^j \leq R \leq F_i^j$, то частота фонона находится в i -ом интервале.

$$\omega = \omega_{0i} + (2R - 1) \cdot \Delta\omega / 2.$$

2) Определение поляризации фонона. Вероятность появления продольного фонона:

$$P_L = \frac{N_L}{N_L + N_T}.$$

где, $N_L = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{L \max}} n_0(T, \omega) D_L(\omega) d\omega$, $N_T = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{T \max}} n_0(T, \omega) D_T(\omega) d\omega$. Если случайное число R меньше P_L , то поляризация данного фонона – L . Иначе, поляризация – T .

3) Определение волнового вектора. Величина волнового вектора определяется по дисперсионному соотношению $\omega(k)$, направление вычисляется по закону сохранения импульса.

4) Определение длины свободного пробега. Вводится интервал времени Δt меньше среднего времени жизни фонона:

$$P_{\text{flight}} = 1 - \exp(-s\Delta t / \tau_i),$$

где, i – тип процесса (N -процесс или U -процесс). Для первого значения $s\Delta t$, когда выполняется случайное число $R < P_{flight}$, получаем время пролёта.

Длина свободного пробега $l = v_g \cdot s\Delta t$.

Получены траектории диффузии фононов при разных температурах (Рис. 3).

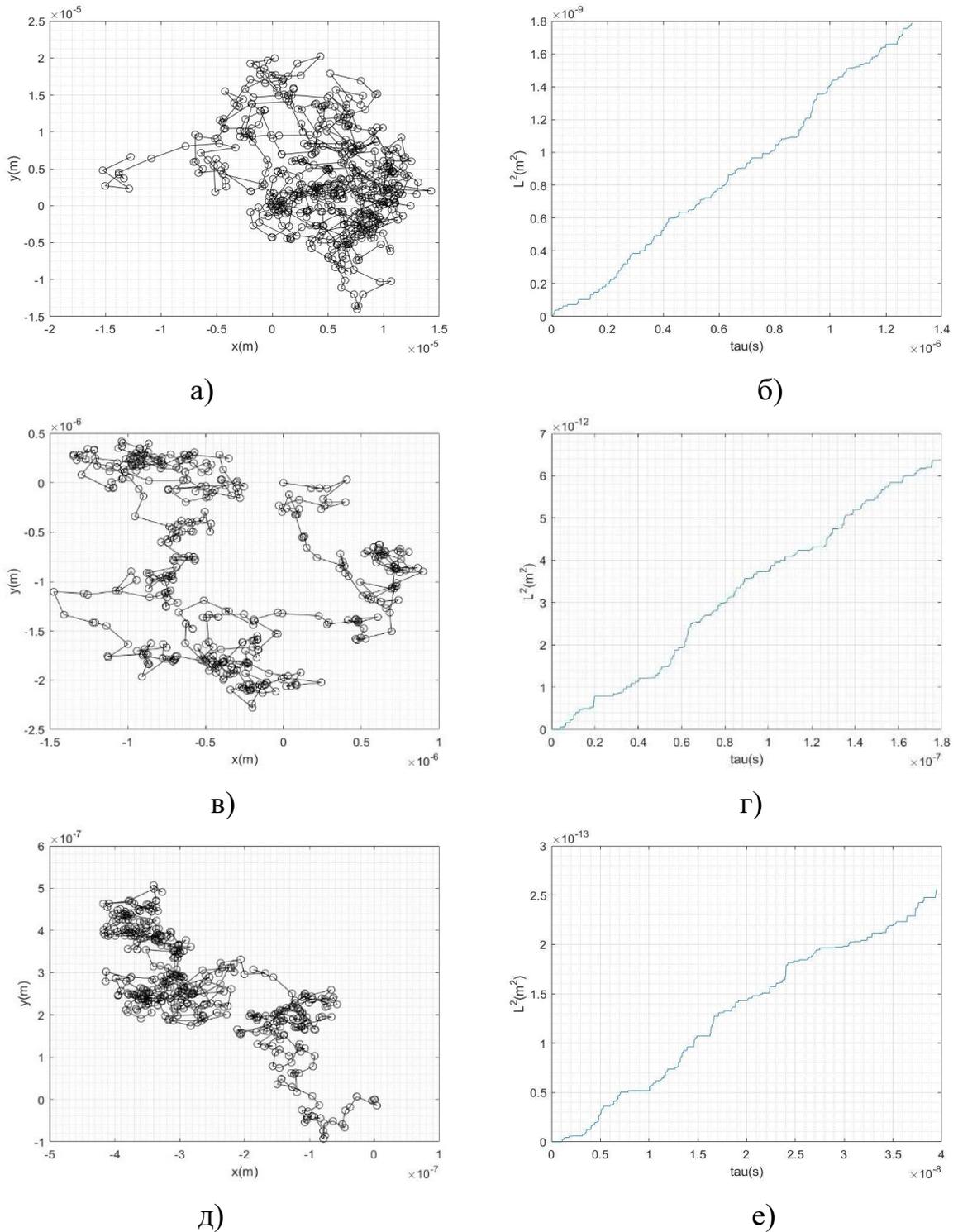


Рис. 3. Траектории диффузии фононов (а, в, д) и временная зависимость квадрата длины свободного пробега (б, г, е): а, б – $T=100\text{K}$; в, г – $T=300\text{K}$; д, е – $T=1000\text{K}$

Выполнены оценки взаимодействия фононов. Проведенные оценки показывают, что диффузия фононов является броуновской при условии ограничения на минимальные значения возможных частот фононов. Так как общее выражение типа диффузии имеет вид $L^2(t) = \text{const} \cdot t^\alpha$, значение $\alpha = 1$ соответствует нормальной броуновской диффузии, $\alpha > 1$ – это диффузия Леви (характеризуется появлением время от времени очень больших длин волн – «полётов Леви»), $\alpha < 1$ соответствует субдиффузии. Из Рис. 3 видно, что диффузия фононов является броуновской, и коэффициенты диффузии получаются из наклона кривой $L^2(t)$.

Определены коэффициенты диффузии и теплопроводности для изотопно чистого кремния Si^{28} и германия Ge^{70} на основе результатов моделирования в широком диапазоне температуры от 100К до 1000К (Таблица 1). Проведены сравнения полученных результатов с данными других авторов и экспериментальными результатами. Полученные результаты показали хорошее согласие с экспериментальными результатами.

Таблица 1 - Параметры взаимодействия фононов и теплопроводности для 2D

Температура (К)	100		300		1000	
Материал	Si^{28}	Ge^{70}	Si^{28}	Ge^{70}	Si^{28}	Ge^{70}
Групповая скорость (м/с)	7067.2	2550.8	6973.7	2441.3	6960.0	2386.5
Длина свободного пробега (м)	7.84e-7	2.91e-7	4.10e-8	4.34e-8	8.42e-9	1.23e-8
Коэфф-ты диффузии (м ² /с)	1.85e-03	2.47e-4	9.54e-05	3.53e-5	1.95e-05	9.76e-6
Теплопроводность (Вт/(м.К))	1030	260.37	156.97	59.57	41.91	17.28
Теплопроводность (Вт/(м.К)) (из эксперимента)	1080	255.63	153	62.47	33	16.84
Теплопроводность (Вт/(м.К)) (ab-initio [N. Mingo, 2014])	1298	305.66	144	68.35	-	-
Относительная ошибка (%)	5%	2%	3%	5%	27%	3%
Относительная ошибка (%) (ab-initio [N. Mingo, 2014])	20%	20%	6%	9%	-	-

Из результатов расчетов, которые выполнены с использованием метода Монте-Карло, следует, что при температурах 100 – 1000 К теплопроводность уменьшается с повышением температуры. Это объясняется тем, что с повышением

температуры доли неупругих процессов (U -процессов) увеличиваются и уменьшаются длины свободного пробега фононов.

В третьей главе проведено обсуждение правила Маттиссена. Оно было пересмотрено на основе статистических результатов, доли N -процессов и U -процессов впервые получены для кремния Si^{28} и германия Ge^{70} (Таблица 2), исходя из условий существования соответствующих процессов по уравнению сохранения квазиимпульса: если $|\bar{k}_1 + \bar{k}_2| \leq k_{\max}$, N -процесс, если $|\bar{k}_1 + \bar{k}_2| > k_{\max}$, U -процесс.

Таблица 2 - Доля U -процесса и N -процесса при разных температурах

$T(K)$	100		300		1000	
Материал	Si^{28}	Ge^{70}	Si^{28}	Ge^{70}	Si^{28}	Ge^{70}
$P_U(\%)$	18%	46%	37%	51%	43%	52%
$P_N(\%)$	82%	54%	63%	49%	57%	48%

Показано, что с повышением температуры доля U -процессов увеличивается, в то же время теплопроводность уменьшается. Сделаны оценки полученных долей и получены впервые константы в формуле Пейлрса (для определения вероятности U -процессов) $P_U = \exp(-\gamma \frac{\theta}{T}) = \exp(-0.428 \frac{645}{T})$ при низких температурах ($T < 100K$).

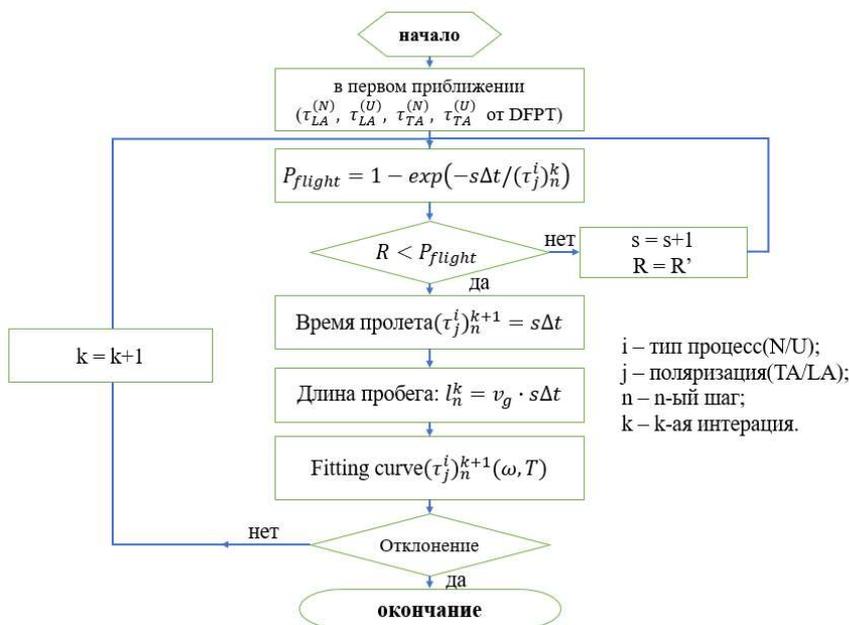


Рис. 4. Схема реализации алгоритма метода итерации

Проведены сравнения времени релаксации фононов на каждом шаге расчета с учетом типа рассеяния и поляризации фононов с результатами других авторов.

Разработан алгоритм метода итерации (Рис. 4). Реализован метод итерации расчёта теплопроводности (Таблица 3). После трех итераций расчета теплопроводность хорошо согласуется с экспериментальными результатами.

Таблица 3 - Параметры взаимодействия фононов и теплопроводности для кремния Si^{28} в 2D после итерации

Температура (К)	100	300	1000
Групповая скорость (м/с)	7.0672e3	6.9737e3	6.9606e3
Длина свободного пробега (м)	7.8373e-7	3.9093e-8	7.1117e-9
Коэффициенты диффузии (м ² /с)	1.85e-3	9.09e-5	1.65e-5
Теплопроводность (Вт/(м.К))	1030	149.53	35.49
Относительная ошибка (%)	5%	2%	8%

В четвертой главе описан алгоритм метода Монте-Карло для моделирования процессов взаимодействия фононов в 3D (Рис. 5).

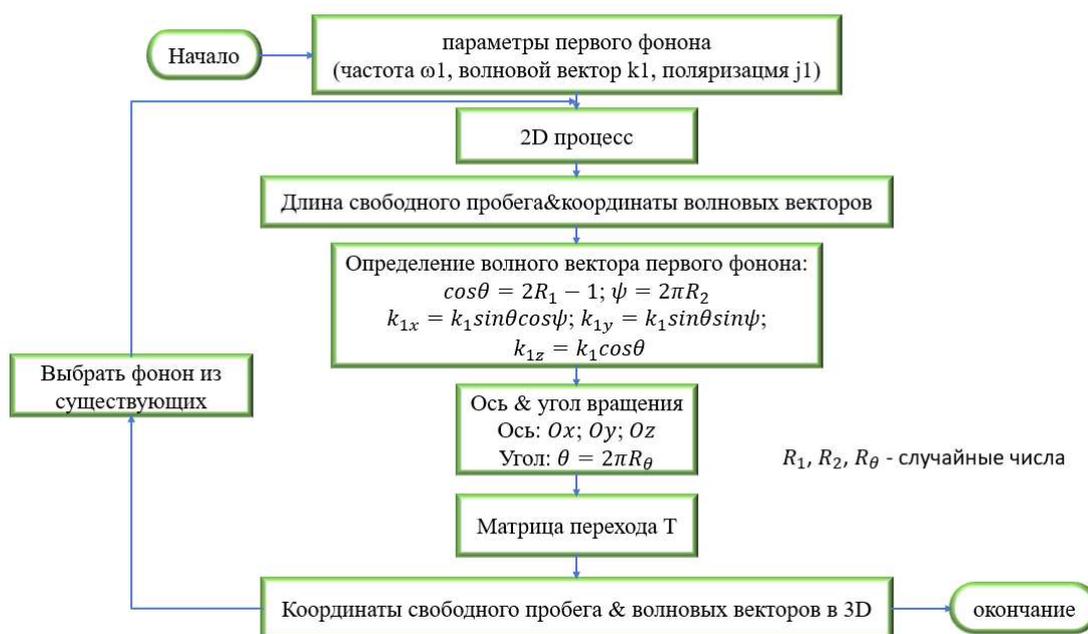


Рис. 5. Схема реализации алгоритма моделирования диффузии фононов в 3D

В трёхмерном варианте используется соответствующая матрица вращения системы координат:

$$R = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_x(\gamma) = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma & -\sin \gamma \\ 0 & \sin \gamma & \cos \gamma \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \cos \alpha \cos \beta & \cos \alpha \sin \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & \cos \alpha \sin \beta \cos \gamma + \sin \alpha \sin \gamma \\ \sin \alpha \cos \beta & \sin \alpha \sin \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \cos \gamma - \cos \alpha \sin \gamma \\ -\sin \beta & \cos \beta \sin \gamma & \cos \beta \cos \gamma \end{bmatrix}.$$

Получены траектории диффузии фононов в трехмерном приближении при разных температурах (Рис. 6).

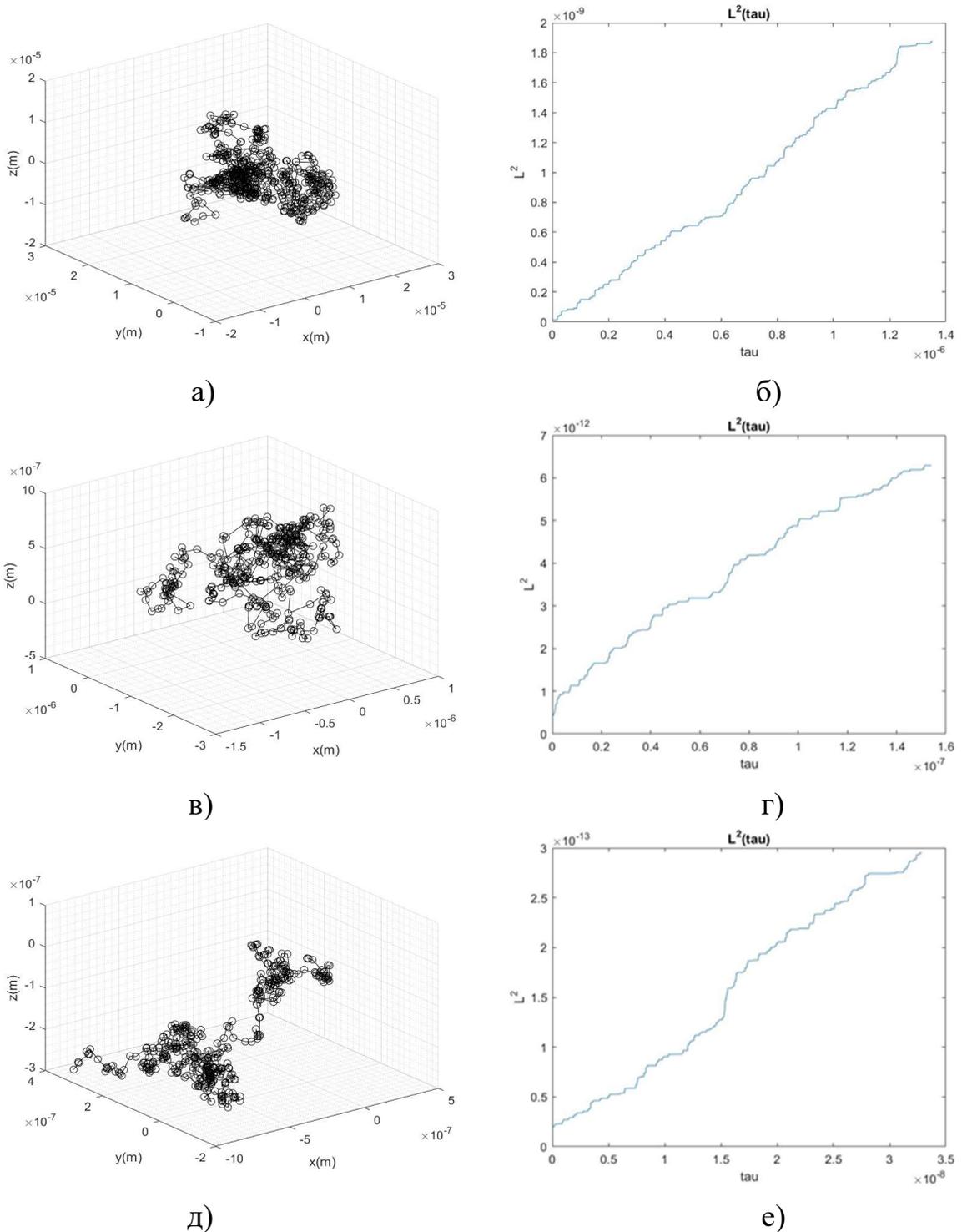


Рис. 6. Траектории диффузии фононов (а, в, д) и временная зависимость квадрата длины свободного пробега (б, г, е): а, б – $T=100\text{K}$; в, г – $T=300\text{K}$; д, е – $T=1000\text{K}$

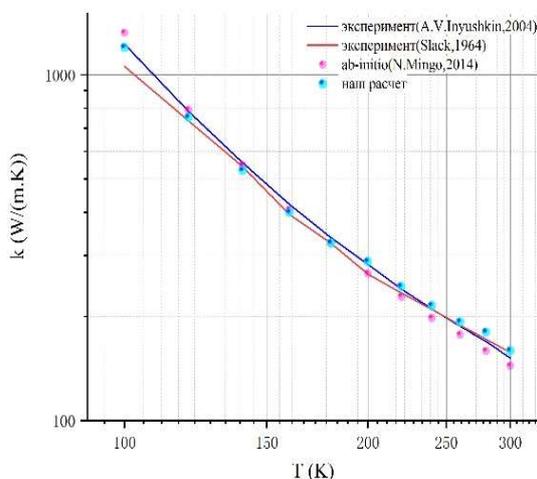
Проведенные оценки траекторий фононов показывают, что диффузия фононов в 3D является классической броуновской диффузией при условии

ограничения на минимальные значения возможных частот фононов. Коэффициенты диффузии получаются из наклона кривой $L^2(t)$.

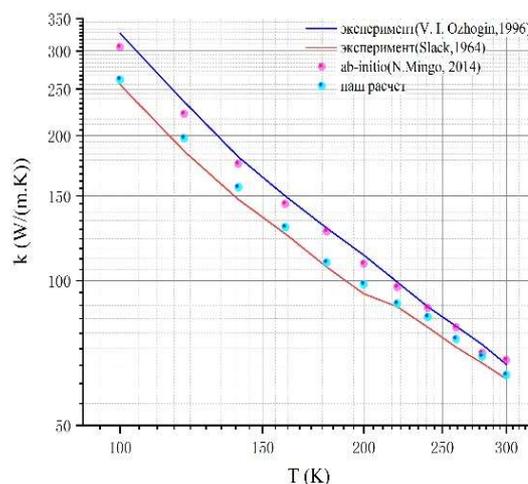
Определены коэффициенты диффузии и теплопроводности для изотопно чистого кремния Si^{28} и германия Ge^{70} на основе результатов моделирования в широком диапазоне температуры от 100К до 1000К (Таблица 4), проведено сравнение полученных результатов с расчётными данными, полученными при использовании других методов, и экспериментальными данными.

Таблица 4 - Параметры взаимодействия фононов и теплопроводности для 3D

Температура (К)	100		300		1000	
Материал	Si^{28}	Ge^{70}	Si^{28}	Ge^{70}	Si^{28}	Ge^{70}
Групповая скорость (м/с)	7054.2	2527.8	7004.9	2471.1	6963.4	2359.0
Длина свободного пробега (м)	7.31e-7	2.80e-7	3.71e-8	4.42e-8	7.69e-9	1.23e-8
Коэфф-ты диффузии (м ² /с)	1.72e-3	2.36e-4	8.67e-5	3.64e-5	1.78e-5	9.74e-6
Теплопроводность (Вт/(м.К))	958.82	238.62	142.73	62.07	38.29	17.25
Относительная ошибка (%)	11%	7%	7%	1%	16%	2%



(а)



(б)

Рис. 7. Зависимости теплопроводности Si^{28} (а) и Ge^{70} (б) от температуры

На Рис. 7 видно, что результаты расчетов хорошо согласуются с результатами экспериментов и других авторов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. Построена математическая модель диффузионных процессов фононов в двумерном и трёхмерном приближениях без использования подгоночных

параметров и без использования правила Маттиссена. Модель отдельно учитывает в принципе все процессы взаимодействия фононов, включая отдельно упругие и неупругие процессы взаимодействия. Впервые строго учтены динамика фононов, взаимодействия фононов друг с другом с использованием законов сохранения и критериев существования N - и U -процессов.

2. Построены численные алгоритмы метода итерации для расчета теплопроводности. Реализован метод итерации расчёта теплопроводности для изотопно чистого кремния Si^{28} и германия Ge^{70} в двумерном и трёхмерном приближениях. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

3. Разработан программный комплекс для численного моделирования диффузионных процессов фононов в двумерном и трехмерном пространстве в собственном фононном газе, определения ряда теплофизических свойств на основе моделирования диффузии фононов, и представления полученных результатов в графическом виде.

4. С помощью созданного комплекса программ выполнены моделирования диффузионных процессов для расчета теплопроводности изотопно чистого кремния Si^{28} и германия Ge^{70} . Результаты расчётов показали, что диффузия фононов является броуновской. Впервые получены сведения о долях происходящих событий: N -процессах и U -процессах в широком диапазоне температур (от 100К до 1000К). Расчёты коэффициентов теплопроводности чистого кремния и германия показали хорошее согласие с расчётными данными других авторов и с экспериментальными данными.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. Хвесюк В.И., Цяо В, Баринов А.А. Диффузия фононов // Труды Седьмой Российской национальной конференции по теплообмену: в 3 томах. М., 2018. Т. 3. С. 293-296. (0.46 п.л. / 0.23 п.л.)

2. Хвесюк В.И., Баринов А.А., Цяо В. Влияние особенностей взаимодействий фононов на перенос тепла // Сборник тезисов XV Российской конференции (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ. М., 2018. С. 142-143. (0.23 п.л. / 0.1 п.л.)

3. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A., Analysis of diffusion processes in a phonon gas // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1382. N.012156. (0.58 п.л. / 0.3 п.л.)

4. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A. A., Modeling of phonon diffusion using a Monte-Carlo method based on physics of phonon // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1368. N.042051. (0.81 п.л. / 0.4 п.л.)

5. Khvesyuk V.I., Qiao W., Barinov A.A., The effect of phonon diffusion on heat transfer // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1385. N.012046. (0.81 п.л. / 0.4 п.л.)

6. Хвесьюк В.И., Цяо В., Баринов А.А., Применение прямого Монте-Карло моделирования для решения задачи диффузии фононов // XI Семинар вузов по теплофизике и энергетике : Материалы Всероссийской научной конференции с международным участием. Санкт-Петербург, 2019. С. 414-415. (0.23 п.л. / 0.1 п.л.)

7. Хвесьюк В.И., Цяо В., Баринов А.А., Процессы диффузии в фононном газе // XXXV Сибирский теплофизический семинар, посвящённый 75-летию д.т.н., профессора В.И. Терехова : Тезисы докладов всероссийской конференции. Новосибирск, 2019. С. 286. (0.23 п.л. / 0.1 п.л.)

8. Khvesyuk V.I., Barinov A.A., Liu B., Qiao W., A review to the specific problems of nano thermal physics. // Journal of Physics: Conference Series. 2020. Vol.1683. N.022073. (0.69 п.л. / 0.2 п.л.)

9. Хвесьюк В.И., Баринов А.А., Лю Б., Цяо В. Принципиально новые подходы решению теплофизических задач применительно к нанoeлектронике // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов : Материалы III Международной конференции. М., 2021. С. 92-94. (0.35 п.л. / 0.1 п.л.)

10. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2022660508. Программный комплекс расчета теплопроводности неметаллических тел на основе моделирования диффузии фононов / Цяо Вэньпэй, Чжэн Цзяюэ. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 06.06.2022.

11. Хвесьюк В.И., Цяо В., Баринов А.А. Определение теплопроводности кремния с детальным учетом кинетики взаимодействия фононов // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки. 2022. №. 3. С.57-68. (1.39 п.л. / 0.7 п.л.)