

УДК 536.2.01

Теплофизические свойства наноструктур: актуальные проблемы и современные методы моделирования на основе машинного обучения

Лю Шисян^(*)

lyu@bmstu.ru

Инь Фэй

yinfei0426@outlook.com

Баринов Александр Алексеевич

barinov@bmstu.ru

Хвесьюк Владимир Иванович

khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Аннотация. В обзорном докладе представлены результаты решения ряда актуальных задач в области исследования теплофизических свойств твердотельных наноструктур. Обнаружен ряд закономерностей, связанных с проявлением квантовых, размерных и поверхностных эффектов (ограничений) на наномасштабах. В частности, ряд эффектов удалось обнаружить благодаря применению средств перспективного метода моделирования — машинного обучения, включая использование нейро-эволюционных потенциалов.

Ключевые слова: теплопроводность, фонон, анизотропия, шероховатость, машинно-обученные потенциалы

Введение. В данной работе рассматриваются наноструктуры, представляющие собой твердотельные структуры, хотя бы один из размеров которых меньше или равен длине пробега переносчиков энергии в макроскопическом образце (прежде всего речь о фононах). В последние годы в области расчета теплофизических свойств наноструктур наблюдается новая волна развития, связанная с улучшением техник численного моделирования и натурного эксперимента. Это позволяет выявлять новые закономерности и углубляться в механизм появления квантовых, размерных и поверхностных эффектов при исследовании теплопроводности и теплоемкости наноструктур. Далее приводится обзор решения ряда актуальных задач, проведенных научным коллективом за последние годы.

Методы и материалы; результаты.

1. Проблема учета реальной морфологии наноструктур при взаимодействии фононов с поверхностью образца, что является отличительной чертой наноструктур, которая не встречается в макроскопических образцах.

Так в работе [1] проведен расчет теплопроводности нитей из кремния диаметром от 1 нм до 1 мкм в диапазоне температур от 100 К до 350 К с использованием собственного расчетного кода, основанного на классических моделях: модели Фукса — Зондхаймера для учета размерного эффекта, нелинейной модели дисперсии для учета квантового эффекта и модели Займана — Соффера для учета влияния средней квадратичной шероховатости нитей.

Анализ результатов расчета показал существенную чувствительность теплопроводности как к диаметру образца, так и к морфологии поверхности. Так как в экспериментальных работах по определению теплопроводности нанонитей практически не приводятся данные по шероховатости поверхности исследуемых образцов, то в расчетах удастся достигнуть хорошего соответствия с экспериментом путем использования шероховатости в качестве варьируемого параметра. Сам факт такой возможности подчеркивает необходимость анализа морфологии поверхности образца при экспериментальном определении теплопроводности, так как без этого не представляется возможным дальнейшее совершенствование и создание надежных методов расчета теплофизических свойств нанонитей, так и в целом наноструктур.

В работе [2] развиты новые теоретические основы расчета процессов рассеяния фононов на шероховатых поверхностях наноструктур, основанные на статистической теории случайных шероховатых поверхностей и анализе углов отражения от таких поверхностей. В [4] предложена модель для описания рассеяния на шероховатых границах с одновременным учетом «высоты» и «периода» шероховатости, основанная на модификации классического подхода Займана — Соффера.

Рассмотрена задача о переносе тепла в графеновых лентах с наличием периодических прямоугольных столбчатых выступов на поверхности [3]. Сравнение результатов расчета, полученных в рамках модели Больцмана и методом молекулярной динамики, позволило количественно оценить относительный вклад волновой и корпускулярной природы фононов в процесс теплопереноса.

2. Наряду с размерным эффектом, важным направлением является исследование квантовых ограничений, проявляющихся в дискретности энергетического спектра и существовании поверхностных мод. В частности, были выявлены аномальные особенности поведения теплоемкости наноструктур (ноноплёнок, нанонитей и квантовых точек кремния размером от 1 до 5,43 нм) при температурах ниже 40 К [5, 6]. Во-первых, в диапазоне размеров от 1 до 5,5 нм показана зависимость теплоемкости этих объектов от размеров. Во-вторых, впервые установлено, что зависимости теплоемкости имеют вид $C_V \sim T^{n(L,T)}$, то есть показатели степени зависят от температуры и размера структуры L при температурах ниже 130 К (температурная граница связана с возникновением квантово-размерного эффекта). Проведенные вычисления стали возможны благодаря использованию машинно-обученных потенциалов, обеспечивающих как эффективность, так и надежность моделирования.

Здесь отдельно хотелось бы подчеркнуть, что в последние годы нейроэволюционный потенциал (НЭП) [7], относящийся к классу машинно-обученных потенциалов, зарекомендовал себя, как один из наиболее перспективных инструментов для моделирования теплофизических свойств наноструктур. Его ключевое преимущество заключается в сочетании высокой точности *ab initio* — методов и вычислительной эффективности классических межатомных потенциалов. НЭП обучен на данных квантово-механических

расчетов (таких как, функции плотности состояний) и поэтому способен воспроизводить энергии и силы атомных конфигураций, что позволяет существенно расширить пространственно-временные масштабы моделирования.

3. Анализ фонон-фононных взаимодействий и учет влияния анизотропии.

В работах [8, 9] проведен расчет теплопроводности графена с учетом двух важных особенностей. Во-первых, это учет пространственной анизотропии свойств [8] графена, в том числе зависимости скорости фононов от направления распространения. Во-вторых, применение самосогласованной итеративной схемы решения методом Монте-Карло, учитывающей взаимосвязь нормальных процессов и процессов переброса [9]. Расчет проведен с использованием собственного кода, в основе которого лежит выполнение законов сохранения импульса и энергии для фононов. Результаты расчета выявили существенную анизотропию теплопроводности — так в зависимости от ориентации графена теплопроводность отличается почти в два раза. Также подтверждена необходимость учета не только трехфононных процессов, но и взаимодействий более высокого порядка (4-го и выше).

Также отдельно хотелось бы выделить задачу об изучении флуктуаций температур в наноструктурах. В работе [6] установлены зависимости флуктуаций от температуры и размеров структуры. Показано, что при стремлении температуры к нулю флуктуации также стремятся к нулю, что соответствует теореме Нернста из термодинамики. Важно подчеркнуть, что знание флуктуаций температуры позволяет провести оценку точности температуры.

Заключение. Проведенные обзор исследований продемонстрировали, что теплофизические свойства наноструктур обладают рядом особенностей, отсутствующих в макроскопических системах. При этом применение классических *ab initio* методов оказывается либо слишком затратными, либо недостаточно точными, что приводит к необходимости написания собственных кодов и использованию перспективных средств моделирования, таких как применение нейро-эволюционных потенциалов.

Список источников

- [1] Liu S. et al. Determination of thermal properties of unsmooth Si-nanowires. *Chin. Phys. Lett.*, 2024, vol. 41, art. no. 016301. <https://doi.org/10.1088/0256-307X/41/1/016301>
- [2] Barinov A.A., Khvesyuk V.I. Statistical model of phonon scattering on rough boundaries of nanostructures. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021, vol. 2057, art. no. 012111. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2057/1/012111>
- [3] Yin F. et al. An enhanced framework for wave reflection from a periodically rough boundary. *Physica B: Condens. Matter*, 2025, vol. 716, art. no. 417743. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2025.417743>
- [4] Liu S. et al. Quantifying particle and wave effects in phonon transport of pillared graphene nanoribbons. *Int. J. Therm. Sci.*, 2025, vol. 217, art. no. 110067. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2025.110067>
- [5] Liu S., Khvesyuk V.I. Temperature fluctuations in quantum dots: Insights from a T^{3/2} heat capacity model. *Phys. Lett. A*, 2025, vol. 534, art. no. 130261. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2025.130261>

-
- [6] Liu S. et al. Temperature dependence of specific heat capacity of nanostructures via neuroevolution machine-learned potential. *J. Appl. Phys.*, 2025, vol. 138, no. 10, art. no. 104301. <https://doi.org/10.1063/5.0284002>
 - [7] Fan Z. et al. Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport. *Phys. Rev. B*, 2021, vol. 104, no. 10, art. no. 104309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309>
 - [8] Yin F., Liu S., Khvesyuk V.I. An optimized force constant model for accurate phonon dispersion in graphene. *AIP Conf. Proc.*, 2025, vol. 3347, art. no. 020033. <https://doi.org/10.1063/5.0290145>
 - [9] Liu S., Yin F., Khvesyuk V.I. Investigating anisotropic three-phonon interactions in graphene's thermal conductivity using Monte Carlo method. *Int. J. Thermophys.*, 2025, vol. 46, no. 2, art. no. 22. <https://doi.org/10.1007/s10765-024-03498-x>