



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту**  
**із виконання наукових досліджень і розробок**  
**«Комп'ютерний дизайн, синтез і теплотранспортні властивості кремнієвих наноструктур для**  
**енергоефективних застосувань»**  
(назва Проєкту)

**Назва конкурсу:** «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»  
**Реєстраційний номер Проєкту:** 2020.02/0067

**Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок** 2020.02/0067  
**«Комп'ютерний дизайн, синтез і теплотранспортні властивості кремнієвих наноструктур для**  
**енергоефективних застосувань»:**

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

## **1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ**

Тривалість виконання Проєкту  
Початок – 04 листопада 2020 року;  
Закінчення – 2022 рік.

Загальна вартість Проєкту, грн 1068670 (один мільйон шістдесят вісім тисяч шістсот сімдесят)

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 119400  
2-й рік 556960  
3-й рік 392310

## **2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

до виконання Проєкту буде залучено 5 виконавців, з них:

доктори наук 0;  
кандидати наук 3;  
інші працівники 2.

## **3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(І) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

Субвиконавців не залучено.

#### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

##### **4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)**

Встановлення фізичних закономірностей теплотранспорту в низькорозмірних напівпровідникових структурах для застосування в області теплового менеджменту сучасних мікро- та наноелектронних компонентів.

##### **4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)**

1) Симуляція морфології наноструктурованих матеріалів. 2) Комп'ютерне моделювання теплопровідності отриманих систем; 3) Виготовлення структур на основі поруватого Si та нанониток; 4) Деформаційна, термічна та радіаційна модифікація отриманих структур; 5) Дослідження теплофізичних властивостей отриманих наноструктур; 6) Порівняльний аналіз результатів моделювання та експериментальних вимірювань.

##### **4.3. Детальний зміст Проєкту:**

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Проблема розуміння та контролю теплоперенесення в нанонитках є актуальною для подальшого прогресу в розвитку теплового менеджменту та розробки термоелектричних пристроїв, що потребує пошуку нових методів зменшення їх теплопровідності. На сьогодні запропонована низка стратегій для керування теплопровідністю Si наноструктур, однак, не всі з цих способів привели до очікуваних змін теплопровідності.

- Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Проєктом передбачено порівняльний аналіз теплопровідності Si наноструктур різної розмірності і морфології. Вперше буде проаналізовано вплив зовнішніх чинників різного походження (деформація термічний відпал, радіаційне опромінення) на теплопровідність наноструктур. В результаті досліджень буде запропоновано оптимальну конфігурацію наноструктур для отримання мінімального значення теплопровідності.

- Методологія дослідження (до 400 знаків)

Методологія досліджень проєкту передбачає поєднання методів комп'ютерного моделювання та експериментальних методик для синтезу, моніторингу якості, проведення технологічних обробок і вивчення теплотранспортних властивостей кремнієвих наноструктур.

#### **5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:**

##### **5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)**

Створено набір програмних кодів для розрахунків теплопровідності кремнієвих наноструктур різної морфології за допомогою пакету молекулярної динаміки LAMMPS.

Отримано коефіцієнти теплопровідності кремнієвих наноструктур, розрахованих з різними потенціалами міжатомної взаємодії та граничними умовами.

Розраховано деформаційні і температурні залежності коефіцієнта теплопровідності кремнієвих нанониток різної морфології в широкому інтервалі температур.

За результатами комп'ютерного моделювання сформовано модель фононного транспорту в кремнієвих нанонитках під дією одновісної деформації.

##### **5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами**

Дослідження Проєкту мають фундаментальне спрямування, науково-технічна продукція не передбачена.

**5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)**

Проєкт не передбачає проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок.

**5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.**

Можливості використання результатів Проєкту в суспільній практиці розглядаються в контексті підвищення ефективності енергоперетворення елементів напівпровідникової термоелектрики завдяки зменшенню теплопровідності робочого матеріалу. Тому результати експериментальних досліджень та комп'ютерного моделювання теплоперенесення в кремнієвих наноструктурах під впливом зовнішніх чинників можуть стимулювати розробку методів оптимізації термоелектричних модулів на основі кремнію. З іншого боку, результати дослідження теплопровідності кремнієвих наноструктур, отримані в процесі виконання проєкту, можуть стати підґрунтям для створення ефективних теплових бар'єрів в елементах кремнієвої мікро- і наноелектроніки, де проблема тепловиділення є однією з ключових на шляху подальшої мініатюризації електричних компонентів та інтегральних схем.

Примітка: Анотований звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування

**Науковий керівник Проєкту**

Доцент кафедри фізики металів  
фізичного факультету  
Київського національного університету  
імені Тараса Шевченка



(підпис)

В.В. Курилюк