



## Разработка комбинированных методов и моделей описания термодинамических свойств кристаллов, твердых растворов и композитных материалов для устройств, функционирующих в условиях высоких температур

**Задача:** создать библиотеку параметров материалов.

**Исследуемые материалы:** твердые растворы  $AxB_1-xC$ , композитные гетероструктуры, классические объемные материалы.

### Ожидаемые результаты:

- теплопроводность и теплоемкость с учетом анизотропности свойств, а также коэффициент теплового расширения, фоновые спектры, силовые константы;
- распределение тепловых характеристик по объему многослойной структуры, в том числе выделение области контакта двух материалов (« $\lambda_1$  материала /  $\lambda_{\text{контакта}(l)}$  /  $\lambda_2$  материал»), с использованием методов молекулярной динамики;
- электронная библиотека с фундаментальными и тепловыми характеристиками.

### Методы:

- QM и MD моделирование с учетом фонон-фононного и электрон-фононного взаимодействия (новая возможность среды моделирования),
- макроскопические модели теплопроводности,
- квадратичная интерполяция для определения
- теплопроводности в твердых растворах  $AxB_1-xC$ ,
- модель теплопроводности, учитывающая поверхностные процессы на границах раздела двух фаз.

### Тип сотрудничества

научно-исследовательское сотрудничество

### Ключевые слова

термодинамический, композитный, теплопроводность, температура

### Контакты

#### Научный руководитель

Виктор Стемпицкий  
к.т.н., доцент  
vstem@bsuir.by

#### Технологический трансфер

science@bsuir.by