



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 AxV_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 (« λ_1 материала / $\lambda_{\text{контакта}(l)}$ / λ_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 AxV_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