



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2022.1.10

УДК 536.2.02

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАНОКРИСТАЛЛОВ

А.В. Северюхин, О.Ю. Северюхина¹, А.В. Вахрушев¹

¹ Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, Ижевск, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 01 марта 2021 г.

Одобрена: 15 марта 2022 г.

Принята к публикации:

01 апреля 2022 г.

Ключевые слова:

модифицированный метод погруженного атома, теплопроводность, молекулярная динамика, моделирование, эксперимент, нанокристалл, LAMMPS.

АННОТАЦИЯ

Методы математического моделирования являются мощными инструментами при проектировании различного типа наносистем и анализа протекающих в них процессов. Отметим, что главными задачами математического моделирования в наномасштабных системах являются: формирование наноэлементов, взаимодействие отдельных элементов наносистемы, определение структуры изолированной наносистемы в динамических состояниях, расчет параметров наносистемы при взаимодействии с окружающей средой, расчет макропараметров наносистемы. Данной работой мы продолжаем последовательное изложение теоретических основ, методов моделирования и результатов расчетов макрохарактеристик наносистем, основанных на работах по моделированию процессов формирования и структуры различных наносистем. В данной работе приводятся физические основы, а также численные методики расчета коэффициента теплопроводности однородных наносистем. Компьютерное моделирование расчета коэффициента теплопроводности нанокристаллов на основе кремния методом молекулярной динамики было проведено в программном комплексе LAMMPS. Рассмотрены уравнения, описывающие многочастичные потенциалы MEAM. Решение задачи определения коэффициента теплопроводности было осуществлено в несколько этапов. В молекулярно-динамических расчетах величину коэффициента теплопроводности можно вычислить различными способами. В данной работе используется формализм Грина – Кубо (Green – Kubo), который связывает автокорреляционную функцию теплового потока с коэффициентом теплопроводности. Определены температурные зависимости коэффициента теплопроводности для материалов на основе кремния. Выполнены расчеты теплофизических характеристик однородных наносистем на основе кремния. Представлены кривые температурной зависимости коэффициента теплопроводности для систем различной размерности. Проведено сравнение данных, полученных с использованием потенциалов MEAM с экспериментальными данными. Выявлено, что характер кривых и значения, полученные при моделировании, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

© ПНИПУ

© Северюхин Александр Валерьевич – к.ф.-м.н., с.н.с., e-mail: severfam@mail.ru, [ID](#): 0000-0002-9319-5681.

Северюхина Олеся Юрьевна – к.ф.-м.н., н.с., e-mail: lesienok@mail.ru, [ID](#): 0000-0001-6014-9462.

Вахрушев Александр Васильевич – д.ф.-м.н., проф., зав. отд., e-mail: vakhrushev-a@yandex.ru,

[ID](#): 0000-0001-7901-8745.

Alexander V. Severyukhin – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher,

[ID](#): 0000-0002-9319-5681.

Olesya Yu. Severyukhina – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Researcher, e-mail: lesienok@mail.ru,

[ID](#): 0000-0001-6014-9462.

Alexander V. Vakhrushev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department,

e-mail: vakhrushev-a@yandex.ru, [ID](#): 0000-0001-7901-8745.



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

CALCULATION OF THE THERMAL CONDUCTIVITY COEFFICIENT OF NANOCRYSTALS

A.V. Severyukhin, O.Yu. Severyukhina¹, A.V. Vakhrushev¹

¹ UdmFRC UB RAS, Izhevsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 01 March 2021

Approved: 15 March 2022

Accepted for publication: 01 April 2022

Keywords:

modified embedded atom method, thermal conductivity, molecular dynamics, simulation, experiment, nanocrystal, LAMMPS.

ABSTRACT

Mathematical modeling methods are powerful tools in the design of various types of nanosystems and the analysis of processes taking place in them. Note that the main tasks of mathematical modeling in nanoscale systems are: the formation of nanoelements, the interaction of individual elements of the nanosystem, the determination of the structure of the isolated nanosystem in dynamic states, the calculation of the parameters of the nanosystem during its interaction with the environment, the calculation of the macro parameters of the nanosystem. With this work, we continue the consistent presentation of theoretical foundations, methods of modeling, and results of calculations of macro characteristics of nanosystems, based on the work on modeling of processes of formation and structure of different nanosystems. This paper provides the physical basis as well as numerical methods for calculating the thermal conductivity of homogeneous nanosystems. Computer simulation of the calculation of the thermal conductivity coefficient of silicon-based nanocrystals by molecular dynamics was carried out in the LAMMPS software complex. Equations describing multi-particle MEAM potentials are considered. The problem of determining the thermal conductivity coefficient has been solved in several steps. In molecular dynamic calculations, the value of the thermal conductivity coefficient can be calculated in various ways. This work uses the Green – Kubo formalism, which associates the autocorrelation function of heat flow with the coefficient of thermal conductivity. Temperature dependencies of thermal conductivity coefficient for silicon-based materials are determined. Calculations of thermophysical characteristics of homogeneous silicon-based nanosystems were made. The curves of the temperature dependence of thermal conductivity coefficient for systems of different dimensions are presented. Data obtained using MEAM potentials were compared with experimental data. It was found that the nature of the curves and the values obtained during the simulation are well consistent with the experimental data.

© PNRPU

Введение

Теплопроводность можно определить как количество тепла, передаваемого через единицу толщины материала – в направлении, нормальном к поверхности единицы площади, – из-за единичного температурного градиента в условиях устойчивого состояния. Теплопроводность – необходимая характеристика для рассеивания образовавшейся тепловой энергии в системе. Прогресс нанотехнологий за последние два десятилетия предоставил разнообразные системы с высокой теплопроводностью из различных типов материалов и топологических форм.

Определение такой характеристики, как теплопроводность материала, является задачей, которой посвящено множество теоретических и экспериментальных исследований. Ввиду этого использование методов математического и компьютерного моделирования является перспективным для описания моделей процессов теплообмена.

В данной работе приведены результаты расчетов теплофизических характеристик наносистем. В представленной статье в продолжение предыдущих исследований авторов [1; 2] рассмотрена задача расчета коэффициента теплопроводности однородных наносистем.

Отметим, что решению задачи определения коэффициента теплопроводности кремния на наноуровне посвящен обширный ряд работ. В исследовании [3] коэффициент теплопроводности равен $20 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$, а в работе

[4] – $235 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$. В статье [5] при моделировании использовался потенциал Стиллингера – Вебера, коэффициент теплопроводности равен $20 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$. В исследовании [6] коэффициент теплопроводности получился $37\text{--}43 \text{ Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$. Отметим, что в источнике [7] получена диаграмма значений коэффициента теплопроводности для систем различной размерности.

1. Постановка задачи

Моделирование системы проводилось с помощью программного пакета LAMMPS [8] методом молекулярной динамики [9]. Выбор потенциала взаимодействия играет важную роль при моделировании. В настоящее время для кремния доступно огромное количество многочастичных потенциалов. Наибольшее распространения при моделировании металлических и полупроводниковых систем применяют EAM (метод погруженного атома) потенциалы [10; 11] и MEAM (модифицированный метод погруженного атома) потенциалы [12–15]. В данной работе использовался потенциал взаимодействия MEAM.

Задача расчета коэффициента теплопроводности может быть решена несколькими способами. Их описание можно найти в работах [16; 17]. В данной работе для определения теплофизических свойств наносистем использован метод Грина – Кубо.

Решение задачи определения коэффициента теплопроводности осуществляется в несколько этапов.

На первом этапе происходит формирование необходимой наноструктуры, которая помещается в расчетную ячейку с периодическими граничными условиями по осям x , y , z .

Второй этап предполагает достижение равновесного состояния моделируемой системы посредством применения NPT ансамбля. Графики температуры и давления на протяжении данного этапа представлены на рис. 1, 2. Целью данного этапа является релаксация системы, при которой расчетная ячейка моделирования доводится до равновесного объема при заданных температуре, давлении и числе атомов. Скорости атомов масштабируются таким образом, чтобы при моделировании температура держалась на заданном уровне. Данный этап должен быть достаточно продолжительным, чтобы система уравнилась. После достижения равновесия, постоянная решетки не будет существенно изменяться и колебаться. В молекулярной динамике важную роль играет выбор временного шага интегрирования, так как он определяет точность и эффективность расчета. Если временной шаг мал, то требуется больше времени вы-

числений для достижения желаемого времени моделирования. Если шаг велик, то большие силы могут развиваться на более легких атомах, что приведет к искусственно быстрым атомам. В работе используется шаг по времени 0,2 фс. Тестовые расчеты показали, что такая величина шага является подходящей для решения данного класса задач.

Третий этап предполагает достижение равновесного состояния моделируемой системы посредством применения NVE ансамбля. На этом этапе моделирования объем (V) и полная энергия (E) системы «заморожены» из-за применения ансамбля NVE. «Удаление» термостатирования (T) и баростатирования (P) освобождает атомные движения из-за искусственного изменения масштаба.

На рис. 3 представлен график температуры на протяжении всего третьего этапа моделирования. Видно, что система держит температуру в районе 300 К без применения термостатов.

На рис. 4, 5 представлены графики общей энергии и объема расчетной ячейки на протяжении всего третьего этапа моделирования NVE.

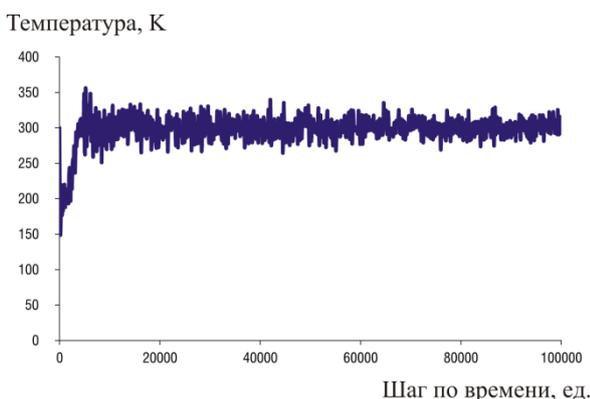


Рис. 1. График температуры системы 4x4x4 на втором этапе моделирования при температуре 300 К

Fig. 1. Temperature graph of a 4x4x4 system at the second stage of modeling at a temperature of 300 K

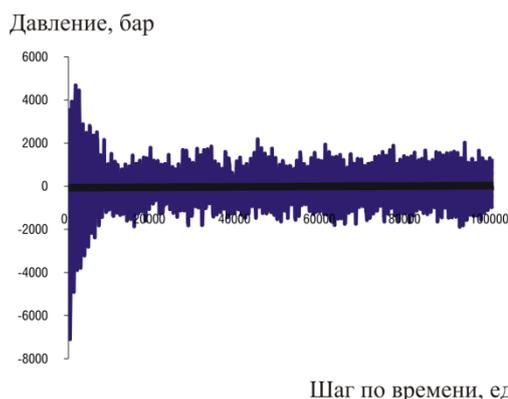


Рис. 2. График давления системы 4x4x4 на втором этапе моделирования при температуре 300 К

Fig. 2. Pressure graph of a 4x4x4 system at the second stage of modeling at a temperature of 300 K

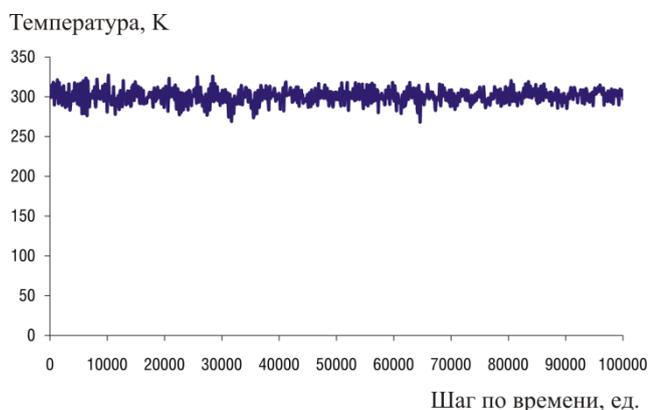


Рис. 3. График температуры системы 4x4x4 на третьем этапе моделирования при температуре 300 К

Fig. 3. Temperature graph of a 4x4x4 system at the third stage of modeling at a temperature of 300 K

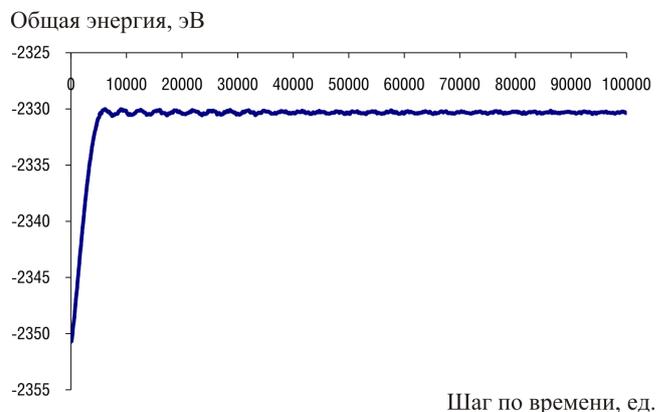


Рис. 4. График энергии системы 4x4x4 на третьем этапе моделирования при температуре 300 К

Fig. 4. Energy diagram of a 4x4x4 system at the third stage of modeling at a temperature of 300 K

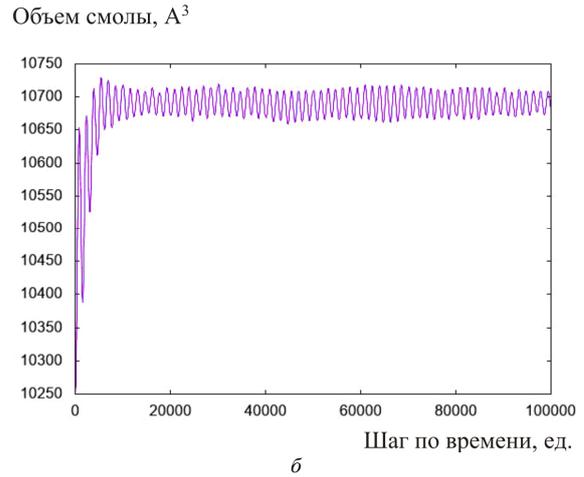
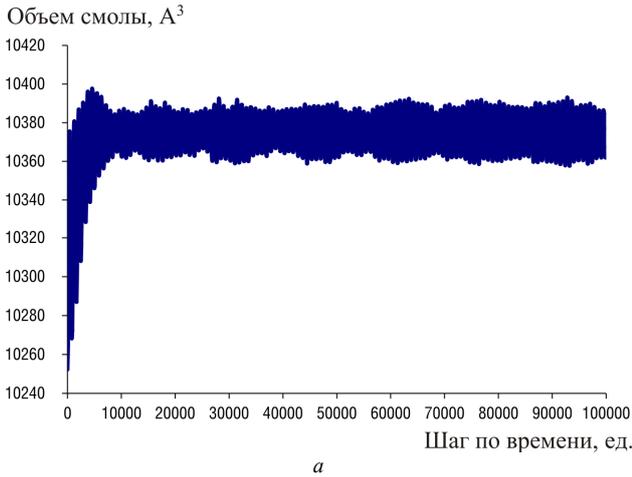


Рис. 5. График изменения объема расчетной ячейки системы 4×4×4 на третьем этапе моделирования при температуре: *a* – 300 К; *b* – 1000 К

Fig. 5. The graph of the change in the volume of the computational cell of the 4×4×4 system at the third stage of modeling at a temperature of: *a* – 300 К; *b* – 1000 К

2. Расчет коэффициента теплопроводности

В молекулярно-динамических расчетах величину коэффициента теплопроводности можно вычислить различными способами [8].

В данной работе используется формализм Грина – Кубо (Green – Kubo), который связывает автокорреляционную функцию теплового потока с коэффициентом теплопроводности. Тепловой поток может быть рассчитан из колебаний потенциальной и кинетической энергии атома и тензора напряжения атома в стационарном уравновешенном моделировании. Это отличие от двух предыдущих неравновесных методов молекулярной динамики (NEMD), где энергия течет непрерывно между горячими и холодными областями в моделируемом образце.

Коэффициент теплопроводности в модели Грина – Кубо рассчитывается по следующей формуле [18; 19]:

$$k = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{k_B T^2 L^d} \int_0^\tau \langle J(t) J(0) \rangle dt, \quad (1)$$

где *k* – коэффициент теплопроводности *d* – мерной системы с линейным размером, *T* – температура, *k_B* – постоянная Больцмана, *J* – компонента потока тепла.

Постоянная времени τ – это минимальное время, необходимое для того, чтобы автокорреляционная функция теплового потока затухала до нуля. Этот метод более подходит для анизотропных систем. Основным недостатком этого метода является то, что для затухания до нуля автокорреляционной функции теплового потока требуется много времени, а получаемые значения теплопроводности зависят от размера системы.

Автокорреляционные функции справа в формуле (1) оцениваются в равновесии, без градиента температуры. Автокорреляция – статистическая взаимосвязь между случайными величинами из одного ряда, но взятыми со сдвигом, например, для случайного процесса – со сдви-

гом по времени. Автокорреляционная функция может быть определена как:

$$\Psi(\tau) = \int f(t) f(t - \tau) dt.$$

Общий тепловой поток в системе вычисляется как

$$J(t) = \int j(x, t) dx,$$

где *j(x, t)* – плотность теплового потока.

Порядок пределов в формуле (1) имеет большое значение. При правильных порядках пределов можно вычислить корреляционные функции с произвольными граничными условиями и применять формулу (1). Существуют различные формы записи уравнения (1) [20–25].

Существуют ситуации, когда формула (1) неприменима. Во-первых, для маленьких систем, которые изучаются в мезоскопической физике, термодинамический предел не имеет смысла. Во-вторых, во многих низкоразмерных системах перенос тепла аномальный и теплопроводность существенно отклоняется от экспериментальных значений [26; 27]. В таких случаях невозможно взять пределы в формуле (3). Поэтому тепловую проводимость рассматривают как функцию от длины *L*. В литературе, посвященной этой тематике [26; 27], обычно в формуле (1) меняют верхний предел интегрирования *t_c* на *L*. Другой способ использования формулы Green – Kubo для конечных систем заключается в том, чтобы внедрять бесконечные резервуары, как это сделано в работах [28; 29].

В данной работе для расчета теплопроводности кремниевых наноструктур был выбран метод Green – Kubo. Для вычисления коэффициента теплопроводности использовалась следующая запись формулы (1) [8; 30]:

$$k = \frac{1}{Vk_B T^2} \int_0^\infty \langle J_x(0) J_x(t) \rangle dt = \frac{1}{3Vk_B T^2} \int_0^\infty \langle J(0) \times J(t) \rangle dt,$$

где *V* – объем системы.

На рис. 6 и 7 приведены значения коэффициента теплопроводности чистого кремния при различной температуре в сравнение с экспериментальными данными. Полученные в нашей работе значения хорошо согласуются с таковыми, представленными в работе для масштабных образцов [32].

Известно, что в металлах и полупроводниках работают два механизма переноса тепла: за счёт электронов и посредством фононов. В чистых металлах процесс переноса тепла осуществляется в основном посредством свободных электронов, концентрация которых на единицу объема в металлах весьма велика. При температурах, близких к абсолютному нулю ($T \rightarrow 0$), концентрация фононов будет мала. Большую роль будет играть электронная теплопроводность. Следует отметить, что в чистых металлах при нормальных условиях теплопро-

водность электронного газа много больше решеточной теплопроводности.

На рис. 6, 7 видно, что при повышении температуры, когда фононная проводимость будет играть большую роль, чем электронная, результаты моделирования и экспериментальные данные хорошо согласуются.

Графики, показанные на рис. 8, 9, представляют собой усредненные корреляционные кривые тепловых потоков. Время сбора автокорреляционных данных должно быть достаточно большим, чтобы автокорреляция затухала до нуля.

Были построены графики теплопроводности в различные моменты времени при температуре 300 К (рис. 9) и 1000 К (рис. 10).

Как видно из рис. 10–11, после 20 пс система стабилизируется, и коэффициент теплопроводности выходит на стационарное значение.

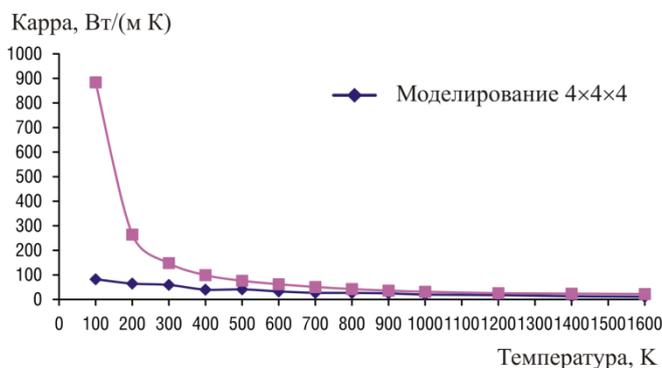


Рис. 6. График теплопроводности, полученный при моделировании системы 4×4×4, в сравнение с экспериментальными данными

Fig. 6. Thermal conductivity graph obtained when simulating a 4×4×4 system in comparison with experimental data

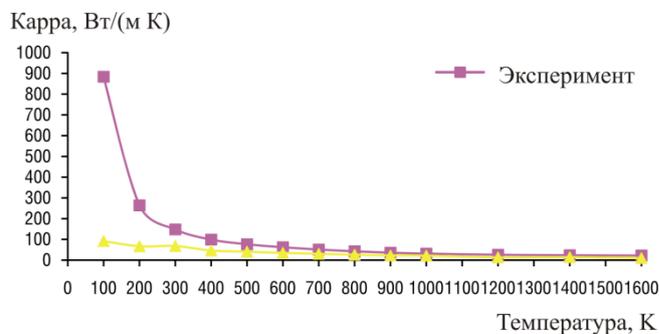


Рис. 7. График теплопроводности, полученный при моделировании системы 10×10×10, в сравнение с экспериментальными данными

Fig. 7. Thermal conductivity graph obtained when simulating a 10×10×10 system in comparison with experimental data

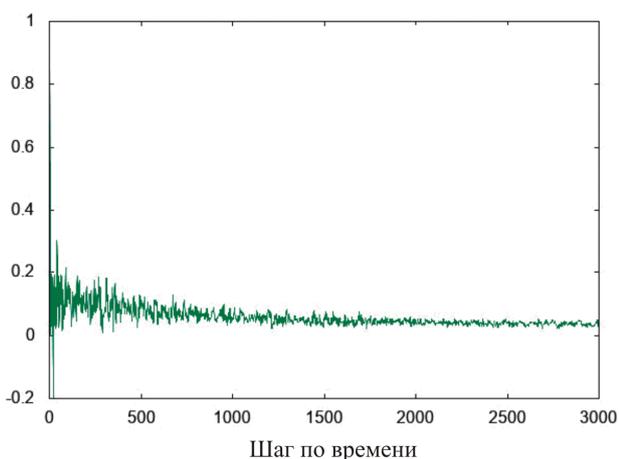


Рис. 8. График автокорреляционной функции теплового потока температуре 300 К

Fig. 8. Graph of the autocorrelation function of the heat flux at a temperature of 300 К

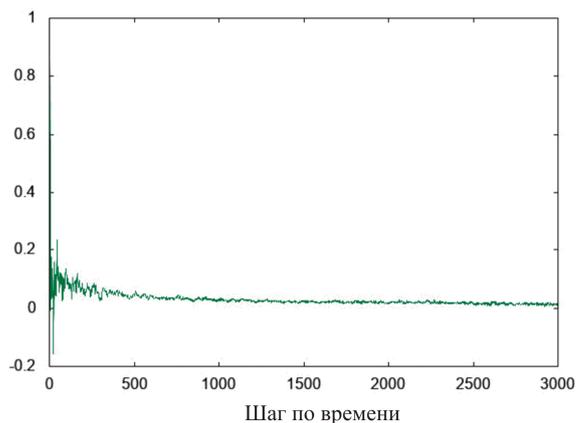


Рис. 9. График автокорреляционной функции теплового потока температуре 1000 К

Fig. 9. Graph of the autocorrelation function of the heat flux at a temperature of 1000 К

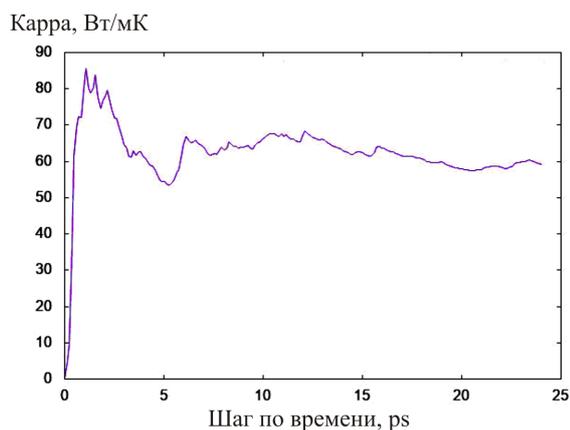


Рис. 10. График теплопроводности при температуре 300 К для системы 4×4×4

Fig. 10. Thermal conductivity graph at a temperature of 300 K for a 4×4×4 system

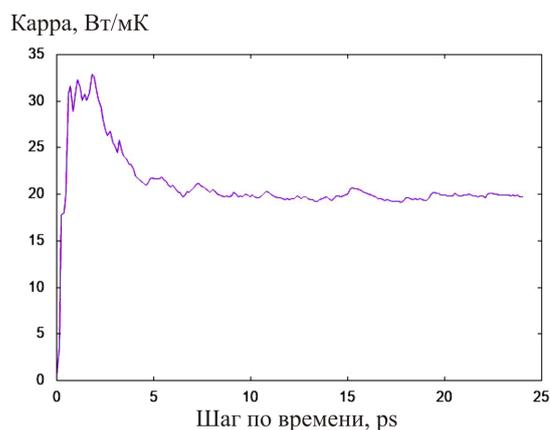


Рис. 11. График теплопроводности при температуре 1000 К для системы 4×4×4

Fig. 11. Thermal conductivity graph at a temperature of 1000 K for a 4×4×4 system

Заключение

Построены физическая и математическая модели процессов теплопроводности в наноматериалах на основе кремния высокой плотности с использованием потенциала взаимодействия MEAM. Изложена методика расчета характеристик данного процесса. Также в работе показаны особенности и различия потенциа-

лов взаимодействия, используемых в молекулярно-динамических расчетах.

Определены зависимости коэффициента теплопроводности кремния от температуры для кристаллов различных размеров. Результаты расчетов показали, что значение коэффициента теплопроводности уменьшается с ростом температуры, что подтверждается экспериментальными исследованиями, результаты которых приведены в работах [34; 35].

Библиографический список

1. Исследование теплофизических свойств наноматериалов на основе кремния методом Green – Kubo с использованием потенциала EDIP / А.В. Вахрушев, А.В. Северюхин, О.Ю. Северюхина, А.Ю. Федотов // Химическая физика и мезоскопия. – 2016. – Т. 18, № 2. – С. 187–198.
2. Исследование теплофизических свойств кремниевых наноматериалов методом Green – Kubo / А.В. Северюхин, О.Ю. Северюхина, А.В. Вахрушев, А.Ю. Федотов // Проблемы механики и материаловедения труды Института механики УрО РАН. – Ижевск. – 2016. – С. 210–223.
3. Schelling P.K., Phillpot S.R. and Keblinski P. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 65. – P. 144306 (12). DOI: 10.1103/PHYSREVB.65.144306
4. Lee Y., Lee S., and Hwang G.S. Effects of vacancy defects on thermal conductivity in crystalline silicon: A nonequilibrium molecular dynamics study // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 83. – P. 125202 (7). DOI: 10.1103/PHYSREVB.83.125202
5. Thermal conductivity reduction in core-shell nanowires / M. Hu, X. Zhang, K.P. Giapis and D. Poulikakos // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 84. – P. 085442 (9).
6. Esfarjani K. and Chen G. Heat transport in silicon from first-principles calculations // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 84. – P. 085204 (11). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.085204
7. Slideserve [Электронный ресурс]. – URL: <http://www.slideserve.com/guang/modeling-thermal-transport-at-single-interfaces-and-in-nanostructured-materials-using-non-equilibrium-molecular-dynamics> (дата обращения: 07.09.2020).

8. Lammmps [Электронный ресурс]. – URL: <https://lammmps.sandia.gov> (дата обращения 07.10.2020).
9. Simulation of the processes of formation of quantum dots on the basis of the transition metals / A.V. Vakhrushev, O.Yu. Severyukhina, A.V. Severyukhin [et al.] // Nanomechanics Sci. Tech. Int. J. – 2012. – Vol. 3. – P. 51–75. DOI: 10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v3.i1.30
10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. – 1984. – Vol. 29, № 12. – P. 6443–6453. DOI: 10.1103/PHYSREVB.29.6443
11. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculations of Hydrogen Embrittlement in Metals // Phys. Rev. Letters. – 1983. – Vol. 50, № 17. – P. 1285–1288.
12. Daw M.S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method // Phys. Rev. B. – 1989. – Vol. 39, № 11. – P. 7441–7452. DOI: 10.1103/PHYSREVB.39.7441
13. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Interatomic potentials for carbon interstitials in metals and intermetallics. Scripta Mater. – 2002. – Vol. 46, № 5. – P. 349–355.
14. Tomar V., Zhou M. Classical molecular-dynamics potential for the mechanical strength of nanocrystalline composite fcc Al+ α -Fe₂O₃ // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73, № 17. – P. 174116.
15. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas. // Phys. Rev. B. – 1964. – Vol. 136, № 3. – P. 864–871. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
16. Вахрушев А.В., Северюхин А.В., Северюхина О.Ю. Расчет макрохарактеристик наносистем. Часть 1. Коэффициент

теплопроводности однородных наносистем // Химическая физика и мезоскопия. – 2017. – Т. 19, № 2. – С. 167–181.

17. Вахрушев А.В., Северюхин А.В., Северюхина О.Ю. Расчет макрохарактеристик наносистем. Часть 2. Коэффициент теплопроводности многокомпонентных наносистем // Химическая физика и мезоскопия. – 2017. – Т. 19, № 4. – С. 538–546.

18. Green M.S. Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids // J. Chem. Phys. – 1954. – Vol. 22. – P. 398–413.

19. Kubo R., Yokota M. and Nakajima S. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance // J. Phys. Soc. Jpn. – 1957. – Vol. 12. – P. 1203–1211.

20. Green M.S. Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids // J. Chem. Phys. – 1954. – Vol. 22. – P. 398–413.

21. Mori H. Statistical-Mechanical Theory of Transport in Fluids // Phys. Rev. – 1958. – Vol. 112. – P. 1829–1842.

22. Green M.S. Comment on a Paper of Mori on Time-Correlation Expressions for Transport Properties // Phys. Rev. – 1960. – Vol. 119. – P. 829–830.

23. Kadanoff L.P. and Martin P.C. Hydrodynamic equations and correlation functions // Annals of Physics. – 1963. – Vol. 24. – P. 419–469.

24. Luttinger J.M. Theory of Thermal Transport Coefficients // Phys. Rev. – 1964. – Vol. 135. – P. A1505–A1514.

25. Visscher W.M. Transport processes in solids and linear-response theory // Phys. Rev. A. – 1974. – Vol. 10. – P. 2461–2472.

26. Lepri S., Livi R. and Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // Phys. Rep. – 2003. – Vol. 377. – P. 1–80. DOI: 10.1016/S0370-1573(02)00558-6

References

1. Vakhrushev A.V., Severyukhin A.V., Severyukhina O.Yu., Fedotov A.Yu. Issledovanie teplofizicheskikh svoystv nanomaterialov na osnove kremniya metodom Green-Kubo s ispolzovaniem potentsiala EDIP [Investigation of thermophysical properties of silicon-based nanomaterials by the Green-Kubo method using the potential of EDIP] *Khimicheskaya fizika i mezoskopiiya – Chemical Physics and Mesoscopy*, 2016, vol. 18, no 2, pp. 187–198.

2. Severyukhin A.V., Severyukhina O.Yu., Vakhrushev A.V., Fedotov A.Yu. Issledovanie teplofizicheskikh svoystv kremnievnykh nanomaterialov metodom Green-Kubo [Investigation of thermophysical properties of silicon nanomaterials by the Green-Kubo method]: *Problemy mehaniki i materialovedeniya. Trudy Instituta Mehaniki* (Problems of mechanics and materials science proceedings Of the Institute of mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences), Izhevsk, 2016, pp. 210–223.

3. Schelling P.K., Phillpot S.R. and Keblinski P. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity, *Phys. Rev. B.*, 2002, vol. 65, p. 144306 (12). DOI: 10.1103/PHYSREVB.65.144306

4. Lee Y., Lee S., and Hwang G.S. Effects of vacancy defects on thermal conductivity in crystalline silicon: A nonequilibrium molecular dynamics study, *Phys. Rev. B.*, 2011, vol. 83, p. 125202 (7). DOI: 10.1103/PHYSREVB.83.125202

5. Hu M., Zhang X., Giapis K.P. and Poulidakos D. Thermal conductivity reduction in core-shell nanowires, *Phys. Rev. B.*, 2011, vol. 84, p. 085442 (9).

6. Esfarjani K. and Chen G. Heat transport in silicon from first-principles calculations, *Phys. Rev. B.*, 2011, vol. 84, pp. 085204 (11). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.085204

27. Kundu A., Dhar A. and Narayan O. The Green–Kubo formula for heat conduction in open systems // *J. Stat. Mech.* – 2009. – I. 3. – L03001. – P. 1–4. DOI: 10.1088/1742-5468/2009/03/L03001

28. Allen K.R. and Ford J. Lattice Thermal Conductivity for a One-Dimensional, Harmonic, Isotopically Disordered Crystal // *Phys. Rev.* – 1968. – Vol. 176. – P. 1046–1055.

29. Fisher D.S. and Lee P.A. Relation between conductivity and transmission matrix // *Phys. Rev. B.* – 1981. – Vol. 23, № 12. – P. 6851–6854.

30. Allen K.R. and Ford J. Lattice Thermal Conductivity for a One-Dimensional, Harmonic, Isotopically Disordered Crystal // *Phys. Rev.* – 1968. – Vol. 176. – P. 1046–1055.

31. Fisher D. S. and Lee P. A. Relation between conductivity and transmission matrix // *Phys. Rev. B.* – 1981. – Vol. 23, № 12 – P. 6851–6854.

32. Lammmps [Электронный ресурс]. – URL: http://lammmps.sandia.gov/doc/compute_heat_flux.html (дата обращения 07.09.2020).

33. Simulation of the processes of formation of quantum dots on the basis of the transition metals / A.V. Vakhrushev, O.Yu. Severyukhina, A.V. Severyukhin [et al.] // *Nanomechanics Sci. Tech. Int. J.* – 2012. – Vol. 3. – P. 51–75. DOI: 10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v3.i1.30

34. Howell P.C. Comparison of molecular dynamics methods and interatomic potentials for calculating the thermal conductivity of silicon // *The Journal of Chemical Physics.* – 2012. – Vol. 137. – P. 224111.

35. Теплофизические свойства компонентов горючих систем / Ю.Е. Шелудяк, Л.Я. Кашпоров, Л.А. Малинин, В.Н. Цалков. – М.: НПО, 1992. – 184 с.

7. Slideserve. Available at: URL: <http://www.slideserve.com/guang/modeling-thermal-transport-at-single-interfaces-and-in-nanostructured-materials-using-non-equilibrium-molecular-dynamics> (accessed 07 September 2020).

8. Lammmps. Available at: URL: <https://lammmps.sandia.gov> (accessed 07 October 2020).

9. Vakhrushev A.V., Severyukhina O.Yu., Severyukhin A.V. et al. Simulation of the processes of formation of quantum dots on the basis of the transition metals, *Nanomechanics Sci. Tech. Int. J.*, 2012, vol. 3, pp. 51–75. DOI: 10.1615/NanomechanicsSciTechnolIntJ.v3.i1.30

10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Phys. Rev. B.*, 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443–6453. DOI: 10.1103/PHYSREVB.29.6443

11. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, Quantum Mechanical Calculations of Hydrogen Embrittlement in Metals, *Phys. Rev. Letters*, 1983, vol. 50, no. 17, pp. 1285–1288.

12. Daw M.S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method, *Phys. Rev. B.*, 1989, vol. 39, no. 11, pp. 7441–7452. DOI: 10.1103/PHYSREVB.39.7441

13. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Interatomic potentials for carbon interstitials in metals and intermetallics, *Scripta Mate.*, 2002, vol. 46, no. 5, pp. 349–355.

14. Tomar V., Zhou M. Classical molecular-dynamics potential for the mechanical strength of nanocrystalline composite fcc Al+ α -Fe₂O₃, *Phys. Rev. B.*, 2006, vol. 73, no. 17, pp. 174116.

15. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas, *Phys. Rev. B.*, 1964, vol. 136, no. 3, pp. 864–871. DOI: [https://DOI.org/10.1103/PhysRev.136.B864](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864)

16. Vakhrushev A.V., Severyukhin A.V., Severyukhina O.Yu. Raschet macrocharacteristic nanosystem. Chast 1. Coefficient teploprovodnosti odnorodnyh nanosystem. [Calculation of macrocharacteristics of nanosystems. Part 1. Coefficient of thermal conductivity of homogeneous nanosystems] *Khimicheskaja fizika i mezoskopija – Chemical Physics and Mesoscopy*, 2017, vol. 19, no 2., pp. 167-181.
17. Vakhrushev A.V., Severyukhin A.V., Severyukhina O.Yu. Raschet macrocharacteristic nanosystem. Chast 2. Coefficient teploprovodnosti mnogocomponentnyh nanosystem. [Calculation of macrocharacteristics of nanosystems. Part 1. Coefficient of thermal conductivity of multicomponent nanosystems] *Khimicheskaja fizika i mezoskopija – Chemical Physics and Mesoscopy*, 2017, vol. 19, no. 4, pp. 538-546.
18. Green M.S. Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids, *J. Chem. Phys.*, 1954, vol. 22, pp. 398-413.
19. Kubo R., Yokota M. and Nakajima S. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 1957, vol. 12, pp. 1203-1211.
20. Green M.S. Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids, *J. Chem. Phys.*, 1954, vol. 22, pp.398-413.
21. Mori H. Statistical-Mechanical Theory of Transport in Fluids, *Phys. Rev.*, 1958, vol. 112, pp. 1829-1842.
22. Green M.S. Comment on a Paper of Mori on Time-Correlation Expressions for Transport Properties, *Phys. Rev.*, 1960, vol. 119, pp. 829-830.
23. Kadanoff L.P. and Martin P.C. Hydrodynamic equations and correlation functions, *Annals of Physics*, 1963, vol. 24, pp. 419-469.
24. Luttinger J.M. Theory of Thermal Transport Coefficients, *Phys. Rev.*, 1964, vol. 135, pp. A1505-A1514.
25. Visscher W.M. Transport processes in solids and linear-response theory, *Phys. Rev. A.*, 1974, vol. 10, pp. 2461-2472.
26. Lepri S., Livi R. and Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices, *Phys. Rep.*, 2003, vol. 377, pp. 1-80. DOI: 10.1016/S0370-1573 (02) 00558-6
27. Kundu A., Dhar A. and Narayan O. The Green–Kubo formula for heat conduction in open systems, *J. Stat. Mech.*, 2009, i. 3, L03001, pp. 1-4 DOI: 10.1088/1742-5468/2009/03/L03001
28. Allen K.R. and Ford J. Lattice Thermal Conductivity for a One-Dimensional, Harmonic, Isotopically Disordered Crystal, *Phys. Rev.*, 1968, vol. 176, pp. 1046-1055.
29. Fisher D.S. and Lee P.A. Relation between conductivity and transmission matrix, *Phys. Rev. B.*, 1981, vol. 23, no. 12, pp. 6851-6854.
30. Allen K.R. and Ford J. Lattice Thermal Conductivity for a One-Dimensional, Harmonic, Isotopically Disordered Crystal, *Phys. Rev.*, 1968, vol. 176, pp. 1046-1055.
31. Fisher D. S. and Lee P. A. Relation between conductivity and transmission matrix, *Phys. Rev. B.*, 1981, vol. 23, no. 12, pp. 6851-6854.
32. URL: http://lammps.sandia.gov/doc/compute_heat_flux.html (available 07.09.2020).
33. Vakhrushev A.V., Severyukhina O.Yu., Severyukhin A.V. et al. Simulation of the processes of formation of quantum dots on the basis of the transition metals. *Nanomechanics Sci. Tech. Int. J.*, 2012, vol. 3, pp. 51-75. DOI: 10.1615/NanomechanicsSciTechnol-IntJ.v3.i1.30, 2012, vol. 137, pp. 224111.
34. Howell P.C. Comparison of molecular dynamics methods and interatomic potentials for calculating the thermal conductivity of silicon. *The Journal of Chemical Physics*, 2012, vol. 137, pp. 224111.
35. Sheludyak Yu.E., Kashporov L.Ya., Malinin L.A., Tsal'kov V.N. Teplofizicheskie svoystva komponentov goryuchih system [Thermal properties of components of combustible systems]. *Moscow, NPO «InformTEI» Publ*, 1992, 184 p.

Финансирование. Работа выполнена по гос. заданию 0427-2019-0029 «Исследование закономерностей формирования и расчет макропараметров наноструктур и метаматериалов на их основе методами многоуровневого математического моделирования».

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Funding. The work was done according to the State Assignment 0427-2019-0029 Study of the patterns of formation and calculation of macroparameters of nanostructures and metamaterials based on them using multilevel mathematical modeling methods.

Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.