



Evaluation of the Heat Transfer Coefficient of Multi-walled Boron Nitride Nanotubes

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

Ghadery H.¹ MSc,
Ghasemi A.*² PhD,
Rouhi S.¹ PhD,
Mahdavi E.³ PhD

How to cite this article

Ghadery H, Ghasemi A, Rouhi S, Mahdavi E. Evaluation of the Heat Transfer Coefficient of Multi-walled Boron Nitride Nanotubes. Modares Mechanical Engineering. 2019;19(9): 2105-2110.

ABSTRACT

In this paper, the thermal conductivity coefficient of multi-walled boron nitride nanotubes has been investigated, using molecular dynamics simulation based on the Tersoff and Lenard Jones potential functions. The effects of diameter, length, and temperature on the thermal conductivity of double-walled boron nitride nanotubes have been studied. Also, by considering the 2, 3, 4, and 5-wall nanotubes, the effect of number of walls on the thermal conductivity of boron nitride nanotubes were studied. Finally, by considering of zigzag and armchair nanotubes, the effect of chirality has been investigated. The results showed that the thermal conductivity coefficient of double-walled boron nitride nanotubes increases by increasing the diameter of nanotubes and decreases by increasing temperature. It had been demonstrated that with 73% and 82% increase in the outer diameter of nanotubes, the thermal conductivity increases 93% and 98%, respectively. Furthermore, regarding to the chirality, the armchair nanotubes have a higher thermal conductivity than the zigzag ones. Also, the simulation results showed that thermal conductivity coefficient increases by increasing the length of boron nitride nanotubes and 50% increase of effective nanotube length increases the thermal conductivity by 25% approximately. Finally, by studying the effect of the number of walls, it is concluded that in the same length and temperature, nanotubes with higher number of walls have higher thermal conductivity coefficient in comparison.

Keywords Thermal Conductivity Coefficient; Multi-Walled Boron Nitride Nanotubes (DWBNT); Molecular Dynamics (MD)

CITATION LINKS

[1] Thermal properties of graphene and multilayer graphene ... [2] Enhancement of thermoelectric performance in β -graphyne nanoribbons ... [3] Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical ... [4] Carbon nanotubes as cancer therapeutic carriers ... [5] Hexagonal boron nitride nanomaterials: advances ... [6] Properties of boron nitride ... [7] Influence of chemical processing on the morphology, crystalline content and thermal stability of ... [8] Boron nitride nanotubes: Pronounced ... [9] Study of machinable silicon carbide-boron ... [10] Thermal conductivity of nanostructured ... [11] Thermal expansion/contraction of boron nitride nanotubes in axial, radial ... [12] Radial elasticity of multi-walled boron ... [13] Specific heat and quantized thermal conductance of single-walled boron nitride ... [14] TDimension, Strength, And Chemical And Thermal Dimension, Strength, And Chemical And Thermal Stability Of A Single C-C Bond In ... [15] Increasing the thermal conductivity of palmitic acid by the addition ... [16] Improved thermal conductivity of epoxy composites using ... [17] Double-walled carbon nanotubes: Challenges ... [18] Curvature-induced metallization of double-walled semiconducting ... [19] Theoretical evidence for T^{1/2} specific heat behavior in ... [20] Elastic moduli of a boron nitride ... [21] Computational molecular dynamics: Challenges, methods ... [22] Comparison of atomic-level simulation methods for computing ... [23] Fast parallel algorithms for short-range molecular ... [24] New empirical approach for the structure and energy of covalent ... [25] Thermal conductivity of multi-walled carbon nanotubes ... [26] Computational physics of carbon ... [27] Interfacial thermal resistance of 2D and 1D carbon/hexagonal boron ... [28] Validity of current force fields for simulations on boron nitride ... [29] A molecular dynamics method for simulations in the canonical ... [30] Canonical dynamics: Equilibrium phase-space ... [31] Electronic and quantum transport properties of substitutionally doped double-walled ... [32] Thermal-conductivity and tensile-properties of BN, SiC and Ge ... [33] Elastic properties of single-wall ... [34] Significant decrease in thermal conductivity of multi-walled carbon nanotube induced by inter-wall van der ...

¹Mechanical Engineering Department, Engineering Faculty, Lan-groud Branch, Islamic Azad University, Guilan, Iran

²Mechanical Engineering Department, Engineering Faculty, North Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

³Mechanical Engineering Department, Mechanical Engineering Faculty, Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran

*Correspondence

Address: Mechanical Engineering Department, Engineering Faculty, North Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Phone: -

Fax: -

a.ghasemi@iau-tnb.ac.ir

Article History

Received: June 05, 2018

Accepted: January 29, 2019

ePublished: September 01, 2019

بررسی ضریب انتقال حرارت نانولوله‌های برون-نیتريدی چندجداره

حسین قادری MSc

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، واحد لنگرود، دانشگاه آزاد اسلامی، گیلان، ایران

علی قاسمی PhD

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، واحد تهران شمال، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

سعید روحی PhD

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، واحد لنگرود، دانشگاه آزاد اسلامی، گیلان، ایران

اقلیما مهدوی PhD

گروه مهندسی مکانیک، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله به بررسی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتريدی چندجداره با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر پایه توابع پتانسیل ترسوف و لنارد-جونز پرداخته شده است. اثرات قطر، طول، دما روی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتريدی دوجداره مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین با در نظر گرفتن نانولوله‌های دو، سه، چهار و پنج جداره، اثر تعداد جداره بر ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتريدی مطالعه شده است. در ادامه، با در نظر گرفتن نانولوله‌های آرمچر و زیگزاگ، اثر کایرالیته نیز بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های دوجداره نیتريدی با افزایش قطر نانولوله، افزایش و با افزایش دما کاهش می‌یابد، به گونه‌ای که با افزایش ۷۳ و ۸۲٪ به قطر خارجی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچر به ترتیب ۹۳ و ۹۸٪ ضریب هدایت حرارتی افزایش می‌یابد. به علاوه، نانولوله‌های آرمچر، ضریب هدایت حرارتی بیشتری نسبت به نوع زیگزاگ دارند. همچنین نتایج شبیه‌سازی بیانگر افزایش ضریب هدایت حرارتی با افزایش طول نانولوله‌های نیتريدی است، به نحوی که افزایش ۵۰٪ طول مؤثر نانولوله، افزایش تقریباً ۲۵٪ ضریب هدایت حرارتی را به دنبال دارد. در نهایت، در بررسی اثر تعداد جداره‌ها مشخص شد که در طول و دمای برابر، نانولوله‌های با تعداد جداره‌های بیشتر، دارای ضریب هدایت حرارتی بیشتری هستند.

کلیدواژه‌ها: ضریب انتقال حرارت، نانولوله‌های نیتريدی چندجداره، دینامیک مولکولی

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۳/۱۵

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۱۱/۰۹

*نویسنده مسئول: a.ghasemi@iau-tnb.ac.ir

۱-مقدمه

نانولوله‌های نیتريدی (BNNT) نانوساختارهای نازک، سبک و مستحکم‌اند که به‌خاطر شکل لانه‌زنبوری ساخته‌شده از پیوند کووالانسی sp^2 ، خواص فیزیکی فوق‌العاده، خواص حرارتی و شیمیایی بسیار پایداری دارند. از این رو در سال‌های اخیر توجه محققان بسیاری را به خود معطوف ساختند [1, 2]. شبکه نانویی نیتريدی یک نانوساختار دوبعدی است که از یک لایه نیتريدی تشکیل شده است. نانولوله‌های نیتريدی به‌عنوان لوله‌های پیچیده‌شده از یک صفحه نیتريدی شش‌ضلعی در نظر گرفته می‌شود. نانولوله‌های نیتريدی از نظر زیست‌محیطی نسبت به نانولوله‌های کربنی دارای سازگاری بهتری هستند [3]. قابلیت زیست‌سازگاری بالای این نانولوله‌ها و غیرسمی بودن آنها، باعث کاربرد وسیع این نانومواد در روش‌های تشخیصی و درمانی بیماری‌ها شده است [4].

علی‌رغم ویژگی‌های مناسب نانولوله‌های کربنی (CNT)، به‌دلیل سمیت، تقریباً برای دارورسانی در سیستم‌های زیستی قابل استفاده نیستند. از این رو نانولوله‌های نیتريدی به‌عنوان یک جایگزین مناسب مورد بررسی قرار گرفته شدند. نانولوله‌های نیتريدی به‌دلیل

عدم سمیت، زیست‌سازگاری بالا و ویژگی‌های منحصر به فردی همانند ویژگی‌های مغناطیسی و سهولت عامل‌دار کردن به‌وسیله مولکول‌های مختلف، قابلیت استفاده در علوم پزشکی، برای مقاصد درمانی و تشخیص را تا حد بالایی دارا هستند [5]. نانوساختارهای نیتريدی علاوه بر مقاومت در مقابل تجزیه در خلأ، هوا و بعضی مایعات [6]، مقاومت قابل توجهی در برابر اکسیداسیون در دمای بالا نسبت به نانولوله‌های کربنی دارند. دمای شروع اکسیداسیون نانولوله‌های نیتريدی 800°C است، در صورتی که برای نانولوله‌های کربنی تحت شرایط مساوی 400°C است. این سطح بالای مقاومت نانولوله‌های نیتريدی در برابر اکسیداسیون، اجازه می‌دهد تا در دماهای بالا قابل استفاده باشند [7, 8]. از این رو در تولید نانوکامپوزیت‌های سرامیکی SiC/BN با قابلیت ماشین‌کاری عالی و خواص مکانیکی بهتر، مورد توجه بسیاری قرار گرفته است [9].

هدایت حرارتی بالا و ویژگی‌های عایق الکتریکی قابل توجه نانولوله‌های نیتريدی، آنها را به‌عنوان یک انتخاب امیدوارکننده برای برنامه‌های آینده در استفاده از مواد رابط حرارتی ارائه می‌دهند (مواد رابط حرارتی، یک ماده برای انتقال حرارت است که بین سطوح گرماده و گرماگیر قرار می‌گیرد تا راندمان انتقال حرارت را افزایش دهند). در چند سال گذشته، توجه زیادی به مواد رابط حرارتی مبتنی بر نانولوله کربنی شده است [10]. همچنین نانولوله‌های کربنی براساس کایرالیته می‌توانند فلزی یا نیمه‌هادی باشند. نانولوله‌های فلزی، رسانا هستند و از لحاظ الکتریکی می‌توانند با اجزای میکروالکترونیک تداخل داشته باشند، اما نانولوله‌های نیمه‌هادی، عایق الکتریکی هستند و برای مواد رابط حرارتی و استفاده در نانو سیال‌ها بسیار مناسب هستند. با توجه به اینکه، کایرالیته نانولوله‌های کربنی را نمی‌توان در طول رشد و تولید، کنترل کرد و همیشه نانولوله‌های کربنی فلزی و نیمه‌هادی با هم شکل می‌گیرند، در سال‌های اخیر، توجه به ویژگی‌های حرارتی نانولوله‌های نیتريدی، به‌خصوص در هدایت حرارتی مورد توجه بسیار قرار گرفته است [11]. از این رو در این مقاله به بررسی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتريدی دوجداره پرداخته شده است.

ژنگ و همکاران به بررسی وابستگی‌های مؤلفه شعاعی مؤثر نانولوله‌های نیتريدی چندجداره روی قطر بیرونی لوله و تعداد لایه‌های نانولوله پرداختند و نشان دادند که تغییر شکل شعاعی نانولوله‌های نیتريدی دوجداره، چندین برابر بیشتر از نانولوله‌های تک‌جداره در قطر مشابه است [12]. ژلیاتو و همکاران دریافتند که BNNTs، هدایت حرارتی بالاتری نسبت به CNTs دارند و همچنین نشان دادند در دمای پایین، گرمای ویژه BNNTs با کاهش دما به‌صورت خطی کاهش می‌یابد [13].

به‌طور کلی، نانولوله‌ها به دو دسته تک‌جداره و چندجداره تقسیم می‌شوند. ویژگی‌های فیزیکی نانولوله‌های تک‌جداره بسیار حساس‌اند و می‌توانند به‌راحتی با حرارت دادن تخریب شوند [14]. نانولوله‌های کربنی دوجداره به‌دلیل ساختار دوجداره خود می‌توانند در مقابل حرارت مقاوم باشند [15, 16]. از این رو نانولوله‌های چندجداره می‌توانند ثبات ترمیمی و شیمیایی بیشتری کسب کنند [17] و به‌دلیل داشتن لایه‌های بیشتر، خواص حرارتی آن می‌تواند تغییر یابد [18, 19]. براساس اطلاعات نویسندگان تاکنون، ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتريدی چندجداره مورد بررسی قرار نگرفته است. با توجه به اهمیت این موضوع، در این مقاله به بررسی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتريدی چندجداره و اثرات قطر و کایرالیته روی آن پرداخته شده است. همچنین به

(eV) $\epsilon = 0.0196439$ و $\epsilon = 0.0196439$ (A°) و $\sigma = 3/380$ برای اتم بور (B) و (A°) $\epsilon = 0.00880292$ (eV) معادل $\epsilon = 0.00880292$ (A°) و $\sigma = 3/215$ برای اتم نیتروژن (N) در این مقاله نظر گرفته شده است [28].

دومین پتانسیل به‌کاررفته، پتانسیل ترسلف (برهم‌کنش واندروالسی) است که توانایی توصیف حالات مختلف تشکیل باند اتم با پارامترهای ثابت را دارد. همچنین دارای کاربرد گسترده در مدل‌سازی ساختارهای کربنی و سیلیکونی و اتم‌های غیرفلزی را دارد [20].

برای رسیدن به تعادل در این شبیه‌سازی، از هنگرد هم فشار-هم دما (NPT) استفاده شده است. برای ثابت‌نگه‌داشتن دمای سمت چپ و سمت راست نانولوله از روش ترموستات نوز-هوور استفاده شده است [29, 30].

۳- پارامترهای شبیه‌سازی

در این شبیه‌سازی دو نوع نانولوله دوجداره آرمیچر و زیگزگ در نظر گرفته شده است. نانولوله آرمیچر به‌صورت $(m,m)@(n,n)$ که در آن $n=m+5$ با فاصله بین‌اتمی 0.356 نانومتر و نانولوله زیگزگ به‌صورت $(m,0)@(n,0)$ که در آن $n=m+9$ با فاصله بین‌اتمی 0.359 نانومتر در نظر گرفته شده است [31]. مشخصات نانولوله‌های به‌کاررفته نوع آرمیچر و زیگزگ در جدول‌های ۱ و ۲ بیان شده است.

دمای شبیه‌سازی سمت چپ نانولوله (T_L) 350 درجه کلوین و سمت راست نانولوله (T_R) 250 درجه کلوین است. گام زمانی شبیه‌سازی یک فمتوثانیه ($1\text{fs}=10^{-15}\text{s}$) است. برای رسیدن به تعادل در دمای متوسط، 500000 گام زمانی (500ps) برای سیستم اجرا شده و در ادامه، 2000000 گام زمانی بعدی (2ns)، مربوط به موقعیت ذرات و سیستم و تثبیت هدایت حرارتی بوده، اجرا شده است. به عبارت دیگر، زمان کافی برای رسیدن سیستم به حالت پایدار غیرتعادلی در شبیه‌سازی‌ها لحاظ شده است [32].

جدول (۱) مشخصات نانولوله‌های آرمیچر

طول نانولوله (نانومتر)	قطر داخلی نانولوله (A°)	قطر خارجی نانولوله (A°)	تعداد اتم	کاپرالیته نوع آرمیچر
۲۰	۶/۹	۱۳/۸	۴۸۰۰	$(5,5)@(10,10)$
۲۰	۹/۶۷	۱۶/۵۷۸	۶۰۸۰	$(7,7)@(12,12)$
۲۰	۸/۸۲	۱۹/۳۴	۷۳۶۰	$(9,9)@(14,14)$

جدول (۲) مشخصات نانولوله‌های زیگزگ

طول نانولوله (نانومتر)	قطر داخلی نانولوله (A°)	قطر خارجی نانولوله (A°)	تعداد اتم	کاپرالیته نوع زیگزگ
۲۰	۳/۹۸۸	۱۱/۱۶۶	۳۷۵۲	$(5,0)@(14,0)$
۲۰	۷/۹۹۶	۱۵/۱۵۴	۵۴۵۲	$(10,0)@(19,0)$
۲۰	۱۱/۱۶۶	۱۸/۳۴۴	۶۹۵۶	$(14,0)@(23,0)$

۴- شبیه‌سازی

در این شبیه‌سازی، برای محاسبه ضریب انتقال حرارت مطابق شکل ۱، ابتدا نانولوله به ۲۰ ناحیه جداگانه با طول ۱۰ آنگستروم برای هر ناحیه تعریف شده است. بعد از به‌تعادل‌رسیدن سیستم، اتم‌های دو انتهای نانولوله در دو ناحیه (ناحیه اول و ناحیه بیستم) ثابت نگه داشته شده و سپس به ناحیه‌های دوم و نوزدهم به‌ترتیب دمای 350 درجه کلوین برای ناحیه گرم و 250 درجه کلوین برای ناحیه سرد اعمال شده است. نواحی نارنجی ناحیه‌های ثابت‌شده و

بررسی اثر اندرکنش‌های واندروالسی نانولوله بیرونی با نانولوله داخلی پرداخته شده است.

روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از بین روش‌های محاسباتی، سریع‌تر است و از آن می‌توان برای سیستم‌های پیچیده با عدد اتمی بالا استفاده نمود. از این رو در این مقاله از روش دینامیک مولکولی استفاده شده است. نانولوله‌های نیترویدیور نیز برحسب آرایش اتم‌های نیتروژن و بور در مقطع لوله به سه دسته مهم نوع آرمیچر، کایرال و زیگزگ تقسیم می‌شوند. نانولوله‌های نیترویدیور بدون در نظر گرفتن نوع کاپرالیته آنها براساس اندازه‌گیری‌های رسانایی، همیشه رفتار نیمه‌هادی یا عایق از خود نشان می‌دهند [20].

نانولوله‌های نیترویدیور به‌دلیل خواص فیزیکی فوق‌العاده، مقاومت در مقابل تجزیه در خلأ، هوا و بعضی مایعات، هدایت حرارتی بالا و ویژگی‌های عایق الکتریکی، مقاومت بالا در برابر اکسیداسیون، عدم سمیت و زیست‌سازگاری بالا در این پژوهش مورد بررسی قرار گرفته است. در این پژوهش، با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیترویدیور چندجداره پرداخته شده است. بدین منظور، اثر پارامترهای هندسی نظیر قطر، طول و پارامتر محیطی دما بر ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیترویدیور چندجداره مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های آرمیچر و زیگزگ مقایسه شده‌اند. در نهایت، اثر تعداد جداره بر ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیترویدیور چندجداره مورد مطالعه قرار گرفته است.

۲- روش شبیه‌سازی

روش دینامیک مولکولی یکی از متداول‌ترین روش‌های عددی برای مدل‌سازی رفتار مواد در مقیاس نانو است. محدوده ابعادی کاربردی این روش از حدود آنگستروم تا میکرومتر است. دقت محاسباتی این روش با مدل‌های مناسب تا حدود 0.1 آنگستروم است. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اولین بار توسط آبلر در سال ۱۹۵۶، به‌عنوان یک روش استاندارد شبیه‌سازی در محاسبات فیزیک آماری مطرح شد [21].

هدایت حرارتی می‌تواند با استفاده از دینامیک مولکولی تعادل (EMD) یا روش‌های غیرتعادلی مولکولی (NEMD) تعیین شود. روش EMD براساس فرمول گرین-کوبو است که مشتق‌گرفته از نظریه پاسخ خطی است [22]. روش NEMD مبتنی بر قانون هدایت حرارتی فوریه است. در این مقاله برای محاسبه ضریب هدایت حرارتی از نرم‌افزار LAMMPS [23] با گام زمانی یک فمتوثانیه و برای ساخت نانولوله‌ها از نرم‌افزار vmd و از روش شبیه‌سازی NEMD استفاده شده است.

برای مدل‌سازی پیوند کووالانسی بین بور و نیتروژن، توابع پتانسیل تجربی متنوعی وجود دارد. در این مقاله برای توصیف این نوع برهم‌کنش (پیوند کووالانسی) از توابع پتانسیل ترسلف [24] استفاده شده است. همچنین به‌منظور توصیف برهم‌کنش‌های بین‌مولکولی (نانولوله‌های داخلی با نانولوله‌های بیرونی) که از جنس واندروالسی هستند، از تابع پتانسیل لندارد-جونز استفاده شده است [25, 26].

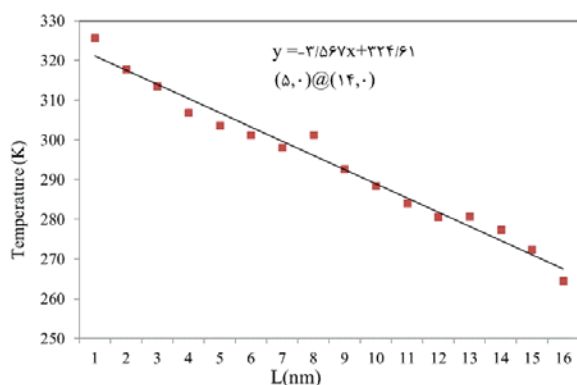
پتانسیل لندارد-جونز متداول‌ترین شکل این پتانسیل است که به‌صورت زیر بیان می‌شود [27].

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

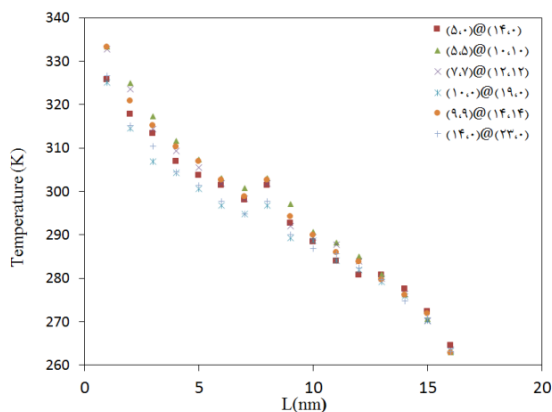
که در آن r فاصله بین اتم‌ها و $\epsilon = 0.4530$ (kcal/mol) معادل

همچنین ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های آرمیچر و زیگزاگ در دماهای ۳۰۰، ۴۰۰ و ۵۰۰ درجه کلوین مورد بررسی قرار گرفت و نتایج در نمودارهای ۴ و ۵ نشان داده شده است. نتایج بیانگر این موضوع است که با افزایش دما، ضریب هدایت حرارتی آنها کاهش می‌یابد.

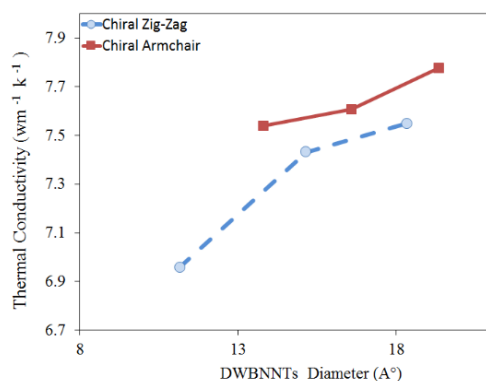
تأثیر طول بر ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های زیگزاگ با طول‌های ۵۰، ۱۰۰، ۱۲۵، ۱۵۰ و ۲۰۰ آنگستروم مورد بررسی قرار گرفته است و نتایج در نمودار ۶ نشان داده شده است. طبق نتایج، با افزایش طول نانولوله‌ها، ضریب هدایت حرارتی آنها نیز افزایش پیدا می‌کند. همچنین با تقریب مناسب می‌توان افزایش ۲۵٪ ضریب هدایت حرارتی را با افزایش ۵۰٪ طول مؤثر نانولوله مشاهده کرد. همچنین نتایج بررسی تعداد جداره‌های ۲، ۳، ۴ و ۵ در نمودار ۷ نشان داده شده است. نتایج حاصله بیانگر افزایش مقدار ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌ها با افزایش تعداد جداره‌ها است.



نمودار (۱) گرادیان دمای نانولوله زیگزاگ با کایرالیته (۱۴,۰)@ (۵,۰)

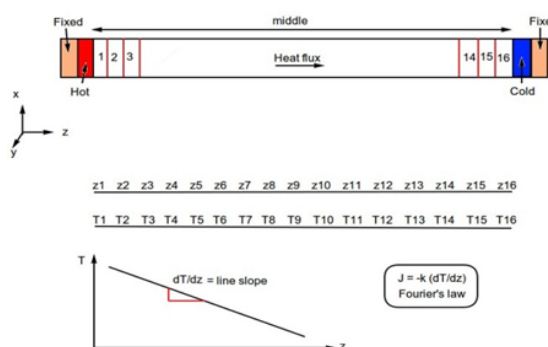


نمودار (۲) گرادیان دما برحسب طول نانولوله با کایرالیته‌های مختلف

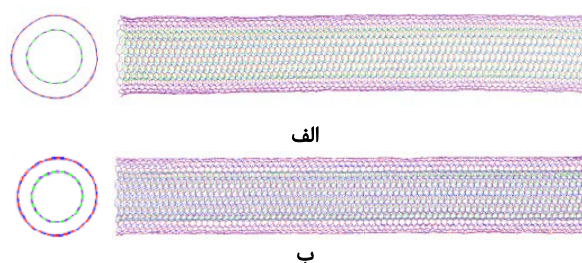


نمودار (۳) ضریب هدایت حرارتی برحسب قطر خارجی نانولوله

نواحی قرمز و آبی به ترتیب ناحیه گرم و سرد هستند. شکل ۲ نمایی از نانولوله نیتريدیور است که پس از اجرای برنامه LAMMPS و بعد از به تعادل رسیدن نانولوله از خروجی نرم‌افزار LAMMPS گرفته شده است.



شکل (۱) تقسیم‌بندی نانولوله به ۲۰ ناحیه مساوی



شکل (۲) نمایی از نانولوله نیتريدیور قبل تعادل و بعد از تعادل: (الف) قبل تعادل، (ب) بعد از تعادل

براساس قانون فوریه [33]:

$$k = -\frac{j}{\nabla T} \quad (2)$$

که در آن k برابر ضریب انتقال حرارت، z شار حرارتی، ∇T گرادیان دما و $\nabla T = \frac{T_L - T_R}{L}$ و L هم طول نانولوله است.

با محاسبه دماهای مختلف در هر ناحیه برحسب طول نانولوله و رسم خط گذرنده از این نقاط طبق نمودار ۱، معادله خط به دست می‌آید. شیب معادله خط، همان گرادیان دما است که از تقسیم آن بر شار حرارتی، ضریب هدایت حرارتی به دست می‌آید. گرادیان دما برای نانولوله‌های نیتريدیور با کایرالیته‌های مختلف برحسب طول نانولوله در نمودار ۲ نشان داده شده است.

همچنین ضریب انتقال حرارت نانولوله‌های دوجداره آرمیچر و زیگزاگ نیتريدیور در نمودار ۳ نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با افزایش قطر نانولوله، ضریب انتقال حرارت آن نیز افزایش پیدا می‌کند. همچنین از نظر کایرالیته، نانولوله‌های نوع آرمیچر، ضریب هدایت حرارتی بیشتری نسبت به نوع زیگزاگ در اتم‌های برابر دارند. قابل ذکر است که نتایج حاصل با نتایج نانولوله‌های چندجداره کربنی تطابق دارد [34].

پروفیل‌های دما برای سه نوع نانولوله‌های نوع آرمیچر و زیگزاگ با طول ۲۰ نانومتر در دماهای ۳۰۰، ۴۰۰ و ۵۰۰ درجه کلوین به ترتیب در اشکال ۶ و ۷ نشان داده شده است. همان‌طور که در نمودارهای ۵ مشهود است، با افزایش دما، ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های دوجداره کاهش می‌یابد. این نتایج با تحقیقات قبلی که در رابطه با نانولوله‌های کربنی چندجداره انجام شده است، همخوانی دارد [34].

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله به بررسی ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتریدبور چندجداره پرداخته شد. به این منظور، اثرات قطر، طول، دما، تعداد جداره‌ها و همچنین کایرالیته بر ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های نیتریدبور چندجداره مورد بررسی قرار گرفت. نشان داده شد که ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌های دوجداره نیتریدبور با افزایش قطر، افزایش پیدا می‌کنند. از نظر کایرالیته، نانولوله‌های نوع آرمیچر، ضریب هدایت حرارتی بیشتری نسبت به نوع زیگزاگ در اتم‌های برابر دارند. افزایش ۵۰٪ طول مؤثر نانولوله منجر به افزایش حدود ۲۵٪ ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌ها می‌شود. با توجه به برازش و تابع به‌دست‌آمده برای طول‌های مختلف مشخص شده است که با افزایش طول نانولوله‌ها، ضریب هدایت حرارتی آنها نیز افزایش پیدا می‌کنند. همچنین مشخص شد که با افزایش تعداد جداره‌ها نیز مقدار ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌ها افزایش می‌یابد. به‌علاوه با بررسی هدایت حرارتی نانولوله‌ها در دماهای مختلف مشاهده شد که ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌ها با افزایش دما به‌طور قابل توجهی کاهش می‌یابد.

تشکر و قدردانی: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.

تاییدیه اخلاقی: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.

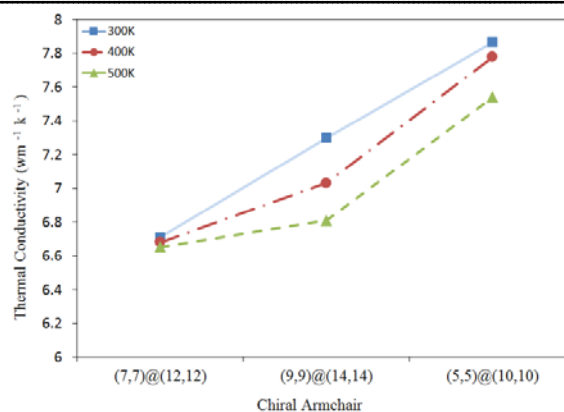
تعارض منافع: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.

سهم نویسندگان: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.

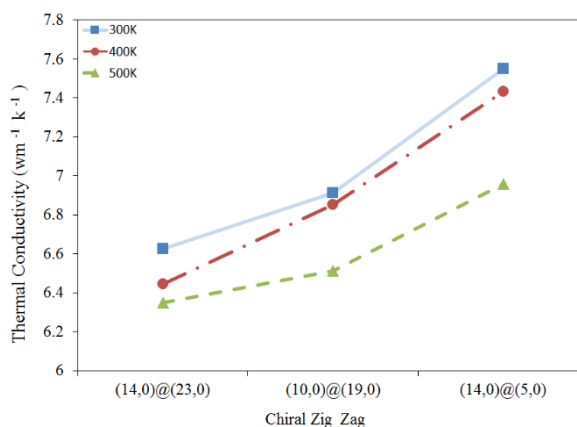
منابع مالی: موردی توسط نویسندگان بیان نشد.

منابع

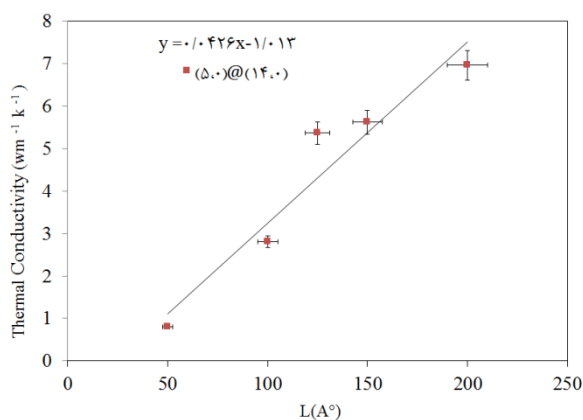
- 1- Shahil KMF, Balandin AA. Thermal properties of graphene and multilayer graphene: Applications in thermal interface materials. *Solid State Communications*. 2012;152(15):1331-1340.
- 2- Zhou WX, Chen KQ. Enhancement of thermoelectric performance in β -graphyne nanoribbons by suppressing phononic thermal conductance. *Carbon*. 2015;85:24-27.
- 3- Li C, Chou TW. Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators. *Physical Review B*. 2003;68(7):073405.
- 4- Son KH, Hong JH, Lee JW. Carbon nanotubes as cancer therapeutic carriers and mediators. *International Journal of Nanomedicine*. 2016;11:5163-5185.
- 5- Fushen L, Fei W, C Li Kong, Yi C. Hexagonal boron nitride nanomaterials: advances towards bioapplications. *Nanoscience and Nanotechnology Letters*. 2012;4(10):949-961.
- 6- Ishigami M, Aloni Sh, Zettl A. Properties of boron nitride nanotubes. In: Koenraad PM, Kemerink M, Technische Universiteit Eindhoven. 12th international conference on scanning tunneling microscopy/spectroscopy and related techniques. Koenraad PM, Kemerink M, editors. College Park MD: American Institute of Physics; 2003. pp. 94-99.
- 7- Yang K, Gu M, Han H, Mu G. Influence of chemical processing on the morphology, crystalline content and thermal stability of multi-walled carbon nanotubes. *Materials Chemistry and Physics*. 2008;112(2):387-392.
- 8- Chen Y, Zou J, Campbell SJ, Le Caer G. Boron nitride nanotubes: Pronounced resistance to oxidation. *Applied Physics Letters*. 2004;84(13):2430.
- 9- Jin HY, Xu H, Qiao GJ, Gao JQ, Jin ZH. Study of machinable silicon carbide-boron nitride ceramic composites. *Materials Science and Engineering A*.



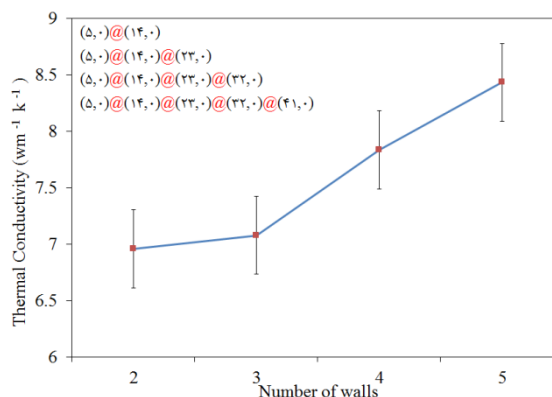
نمودار ۴) ضریب هدایت حرارتی نانولوله آرمیچر در دماهای مختلف



نمودار ۵) ضریب هدایت حرارتی نانولوله زیگزاگ در دماهای مختلف



نمودار ۶) ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌ها بر حسب طول



نمودار ۷) ضریب هدایت حرارتی نانولوله‌ها بر تعداد دیواره‌ها

Berlin/Heidelberg: Springer Science & Business Media; 2012.

22- Schelling PK, Phillpot SR, Keblinski P. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity. *Physical Review B*. 2002;65(14):144306.

23- Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. 1995;117(1):1-19.

24- Tersoff J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Physical Review B*. 1988;37(12):6991.

25- Hu GJ, Cao BY. Thermal conductivity of multi-walled carbon nanotubes: Molecular dynamics simulations. *Chinese Physics B*. 2014;23(9):096501.

26- Rafii Tabar H. Computational physics of carbon nanotubes. Cambridge UK: Cambridge University Press; 2008.

27- Li T, Tang Z, Huang Z, Yu J. Interfacial thermal resistance of 2D and 1D carbon/hexagonal boron nitride van der Waals heterostructures. *Carbon*. 2016;105:566-571.

28- Hilder TA, Yang R, Ganesh V, Gordon D, Bliznyuk A, Rendell AP, et al. Validity of current force fields for simulations on boron nitride nanotubes. *Micro & Nano Letters*. 2010;5(2):150-156.

29- Nosé Sh. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. *Molecular Physics*. 1984;52(2):255-268.

30- Hoover WG. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*. 1985;31(3):1695.

31- Lopez-Bezanilla A. Electronic and quantum transport properties of substitutionally doped double-walled carbon nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2014;118(3):1472-1477.

32- Shen HJ. Thermal-conductivity and tensile-properties of BN, SiC and Ge nanotubes. *Computational Materials Science*. 2009;47(1):220-224.

33- Hernández E, Goze C, Bernier P, Rubio A. Elastic properties of single-wall nanotubes. *Applied Physics A*. 1999;68(3):287-292.

34- Zhang X, Zhou WX, Chen XK, Liu YY, Chen KQ. Significant decrease in thermal conductivity of multi-walled carbon nanotube induced by inter-wall van der Waals interactions. *Physics Letters A*. 2016;380(21):1861-1864.

2008;483-484:214-217.

10- Tang C, Bando Y, Liu C, Fan Sh, Zhang J, Ding X, et al. Thermal conductivity of nanostructured boron nitride materials. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2006;110(21):10354-10357.

11- Mashreghi A. Thermal expansion/contraction of boron nitride nanotubes in axial, radial and circumferential directions. *Computational Materials Science*. 2012;65:356-364.

12- Zheng M, Ke C, Bae IT, Park C, Smith MW, Jordan K. Radial elasticity of multi-walled boron nitride nanotubes. *Nanotechnology*. 2012;23(9):095703.

13- Xiao Y, Yan XH, Cao JX, Ding JW, Mao YL, Xiang J. Specific heat and quantized thermal conductance of single-walled boron nitride nanotubes. *Physical Review B*. 2004;69(20):205415.

14- Sun CQ, Bai HL, Tay BK, Li S, Jiang EY. Dimension, Strength, And Chemical And Thermal Stability Of A Single C-C Bond In Carbon Nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2003;107(31):7544-7546.

15- Wang J, Xie H, Xin Z, Li Y. Increasing the thermal conductivity of palmitic acid by the addition of carbon nanotubes. *Carbon*. 2010;48(14):3979-3986.

16- Zhou T, Wang X, Liu X, Xiong D. Improved thermal conductivity of epoxy composites using a hybrid multi-walled carbon nanotube/micro-SiC filler. *Carbon*. 2010;48(4):1171-1176.

17- Shen C, Brozena AH, Wang Y. Double-walled carbon nanotubes: Challenges and opportunities. *Nanoscale*. 2011;3(2):503-518.

18- Okada S, Oshiyama A. Curvature-induced metallization of double-walled semiconducting zigzag carbon nanotubes. *Physical Review Letters*. 2003;91(21):216801.

19- Popov VN. Theoretical evidence for $T^{1/2}$ specific heat behavior in carbon nanotube systems. *Carbon*. 2004;42(5-6):991-995.

20- Verma V, Jindal VK, Dharamvir K. Elastic moduli of a boron nitride nanotube. *Nanotechnology*. 2007;18(43):435711.

21- Deuffhard P, Hermans J, Leimkuhler B, Mark AE, Reich S, Skeel RD, editors. Computational molecular dynamics: Challenges, methods, ideas: Proceeding of the 2nd international symposium on algorithms for macromolecular modelling, Berlin, May 21-24, 1997.