

تأثیر میدان الکتریکی بر رفتار فازی آب بین دو صفحه بور نیتريد

حامد رزاق نیا^۱، محمد کمالوند^{۲*}

مشخصات نویسنده اول

۱- دانشجو کارشناسی ارشد، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد hamed.rnn74@gmail.com

مشخصات نویسنده دوم

۲ و * - نویسنده مسئول: دانشیار، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی و دانشگاه یزد kamalvand@yazd.ac.ir

واژگان کلیدی: آب محدود شده، انتقال فاز، شبیه سازی دینامیک مولکولی، صفحه بور نیتريد، میدان الکتریکی

مقدمه

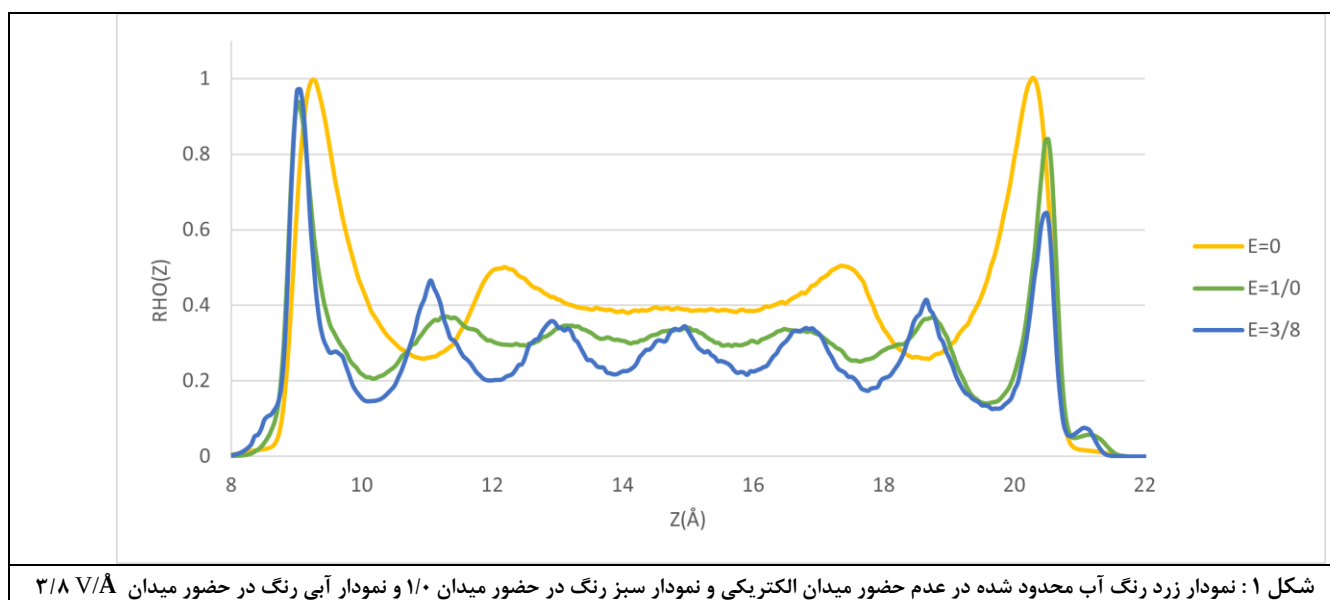
نیاز فوری جوامع به مواد با رسانایی گرمایی بسیار بالا برای همگام شدن با توسعه سریع صنعت الکترونیک، منجر به اکتشاف و استفاده از نانوصفات بور نیتريد شش ضلعی (BNNS) به عنوان یک ماده ایده آل برای کاربردهای پخش و انتقال گرمایی شد. BNNS ها دارای هدایت گرمایی، استحکام مکانیکی و مقاومت در برابر اکسیداسیون زیاد و همچنین عایق الکتریسیته بوده و چگالی کمی دارند (An et al., 2023). بور نیتريد یک ترکیب شیمیایی با تعداد برابر نیتروژن و بور بوده که در سال ۱۸۴۲ برای اولین بار بور نیتريد با استفاده از پتاسیم سیانید و اسید بوریک مذاب سنتز شد (Pakdel et al., 2014). موادی مانند گرافن، بورنیتريد شش ضلعی، ژرمانیوم و سیلیسیوم به دلیل ویژگی های مناسبی مانند مدول یانگ بالا و سطح ویژه زیاد، کاربردهای موثری در زمینه هایی مانند کاتالیزور و فوتوالکتریک دارند (Wang et al., 2017). از سوی دیگر، در حال حاضر سیالات محدود شده در فضاهای نانومتری مانند نانولوله ها مورد توجه قرار گرفته اند. درک خواص آب محدود شده برای کاربردهایی مانند تولید ولتاژ، دستگاه های جریان سریع، سنجش جریان و نانوسیالات مهم است. آب محدود شده همچنین نقش مهمی در بسیاری از فرآیندهای بیولوژیکی مانند جریان از طریق کانال های یونی نیز ایفا می کند (Chakraborty et al., 2017). انتظار می رود آب محدود شده در فضاهای کوچک ویژگی های متفاوت و غیر معمولی را از خود نشان دهد (Fu et al., 2011). به علاوه، حضور میدان الکتریکی نیز به دلیل تأثیر بر جهت گیری دوقطبی مولکول های آب می تواند این رفتار غیرمعمول را تشدید کند (Zhang & Su, 2021).

روش پژوهش

در این پژوهش اثر میدان الکتریکی بر آب محدود شده بین دو صفحه بور نیتريد بررسی شده است. صفحات و تعداد مولکول های آب با نرم افزار MATLAB و VMD ساخته شده و برای شبیه سازی از برنامه LAMMPS استفاده شد. که در این پژوهش دما ۲۹۸ کلوین و فشار ۱ اتمسفر و همچنین ۸۲۶ مولکول آب درون جعبه ای به ابعاد $30 \times 30 \times 30$ آنگستروم در نظر گرفته است. یکی از صفحات بور نیتريد در فاصله ۶ آنگستروم از جعبه و فاصله صفحه دیگر از ۲ تا ۵ برابر قطر مولکول آب در نظر گرفته شد. با بررسی ساختار سیال محدود شده، انتقال فاز آب قرار در این محدوده مورد بررسی قرار گرفت. سپس در سه راستای X و Y و Z هر کدام به طور جداگانه میدان از 0.1 تا 4.0 V/Å اعمال و انتقال فاز آب محدود شده مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت.

بحث و نتیجه گیری

نتایج شبیه سازی نشان می دهد که اعمال میدان الکتریکی در راستای افقی (موازی با صفحات بور نیتريد)، تاثیری بر رفتار فازی آب محدود شده ندارد. از سوی دیگر، اعمال میدان در راستای عمود بر صفحات می تواند رفتار فازی آب محدود شده را دستخوش تغییر گرداند. نتایج نشان می دهند که در حفره هایی که فاصله دو صفحه بور نیتريد کمتر از ۳ برابر قطر تقریبی مولکول آب باشد، اعمال میدان تاثیری بر ساختار نخواهد داشت. ولی با افزایش فاصله دو دیواره، همانگونه که در شکل ۱ برای فاصله ۳/۵ برابر قطر مولکول آب دیده می شود، پس از اعمال میدان، تعداد لایه های مولکولی موازی با دیواره ها به طور قابل توجهی افزایش می یابد که دلیلی بر تغییر محسوس ساختار سیال است. برای تایید وقوع انتقال فاز، چگالی میانگین آب محدود شده برحسب میدان اعمال شده نیز مورد بررسی قرار گرفت که نتایج نشان می دهند مشتق اول چگالی برحسب میدان یک تغییر شدید در میدان ۲/۱ V/Å را نشان می دهد که تاییدی بر وقوع انتقال فاز در اثر اعمال میدان الکتریکی در راستای عمود بر دیواره هاست.



منابع و مراجع

- [1] An, L., Yu, Y., Cai, Q., Mateti, S., Li, L. H., & Chen, Y. I. (2023). Hexagonal boron nitride nanosheets: preparation, heat transport property and application as thermally conductive fillers. *Progress in Materials Science*, 138, 101154.
- [2] Chakraborty, S., Kumar, H., Dasgupta, C., & Maiti, P. K. (2017). Confined water: structure, dynamics, and thermodynamics. *Accounts of chemical research*, 50(9), 2139-2146.
- [3] Fu, Z., Luo, Y., Ma, J., & Wei, G. (2011). Phase transition of nanotube-confined water driven by electric field. *The Journal of Chemical Physics*, 134(15).
- [4] Pakdel, A., Bando, Y., & Golberg, D. (2014). Nano boron nitride flatland. *Chemical Society Reviews*, 43(3), 934-959.
- [5] Wang, J., Ma, F., & Sun, M. (2017). Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications. *RSC advances*, 7(27), 16801-16822.
- [6] Zhang, X., & Su, J. (2021). Effect of nanotube diameter on the transport of water molecules in electric fields. *Journal of Molecular Liquids*, 328, 115382.