

اثر میدان الکتریکی بر انتقال گرمای آب محدود شده بین دو صفحه نیتريد بور

سارا جهان آبادی^۱، محمد کمالوند^۲

^۱- دانشجو دکتری، شیمی، شیمی فیزیک، دانشکده شیمی - دانشگاه یزد sa.jahan.abadii@gmail.com

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

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

مقدمه

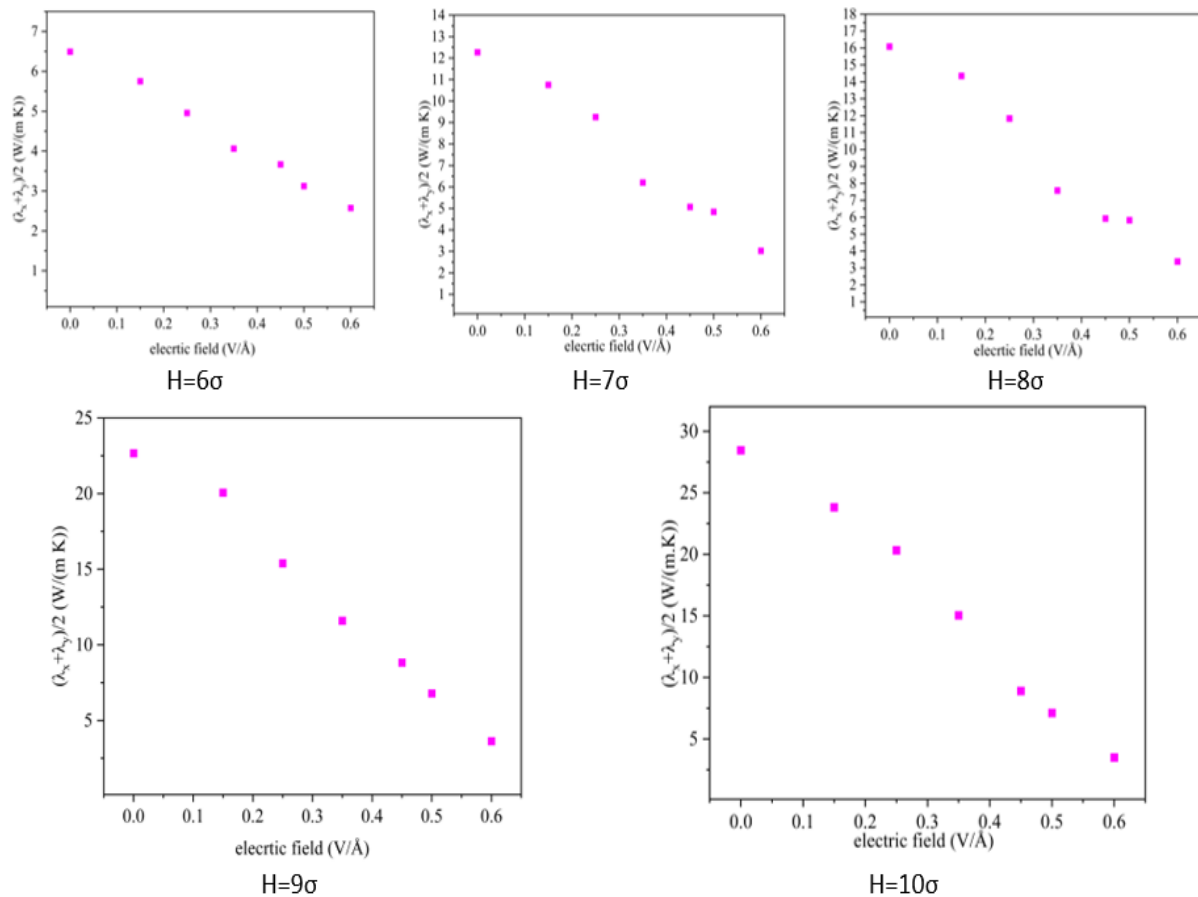
امروزه نانوساختارها کاربردهای بسیار زیادی در زمینه های مختلف همچون بهبود رفتار حرارتی [۱] مواد دارند. از مهم ترین کاربردهای نانوساختارها می توان به انتقال جرم (شامل جابجایی اتم ها/ مولکول ها) و انتقال گرما توسط آن ها اشاره کرد. در بین گونه های مختلف نانوساختارها، نانوصفحات حرارت را با بیشترین بازده انتقال می دهند [۲]. از سوی دیگر نانو صفحات نیتريد بور از مناسب ترین مواد در زمینه انتقال گرما و جرم به شمار می روند که دارای پایداری شیمیایی و فیزیکی هستند [۳]. در ترمودینامیک، سیال انتقال گرما گاز یا مایعی است که به عنوان واسطه در سرمایش و گرمایش در فرآیندهای انتقال گرما نقش ایفا می کند. آب از پرکاربردترین سیال های انتقال گرما به شمار می رود. از همین رو به بررسی انتقال گرمای آب محدود شده بین نانوصفحات نیتريد بور در حضور میدان الکتریکی اعمال شده در راستای عمودی Z پرداخته می شود.

روش پژوهش

در این پژوهش، از نرم افزار LAMMPS که یکی از نرم افزارهای محاسباتی مبتنی بر شبیه سازی دینامیک مولکولی است، استفاده شده است. همچنین، برای بررسی برهمکنش بین مولکول های آب از مدل SPC/E [۴] استفاده شد. محاسبه ضریب انتقال گرما با روش گرین-کوبو [۴،۵] انجام شد. ضریب انتقال گرما دارای سه مولفه است که شامل مولفه های افقی x و y (تقریباً با یکدیگر برابرند و به صورت میانگین گزارش می شود) و مولفه عمودی Z می باشد. در این پژوهش دما 300 K و ابعاد جعبه شبیه سازی $22(X) \times 24(Y) \times H(Z) \text{ \AA}$ می باشد، که مقدار H (فاصله دو صفحه نیتريد بور بالایی و پایینی) از 4σ تا 10σ (σ قطر اتم اکسیژن) متغیر می باشد. میدان الکتریکی اعمال شده در راستای عمودی z از 0 تا $0.6 \frac{\text{V}}{\text{\AA}}$ (در جهت عمودی z) است.

بحث و نتیجه گیری

در شکل ۱ میانگین مولفه های افقی ضریب انتقال گرما بر حسب میدان الکتریکی نمایش داده شده است. روند کاهشی ضریب انتقال گرما برای $H \geq 6\sigma$ گرما بر حسب افزایش میدان الکتریکی کاملاً واضح است. بنابراین، می توان ادعا کرد که با افزایش میدان الکتریکی در راستای عمود بر دیواره ها، ضریب انتقال گرما در راستای موازی با دیواره ها کاهش می یابد. با توجه به ساختار جامد گونه سیال محدود شده، احتمال می رود دلیل کاهش ضریب انتقال گرما با افزایش میدان الکتریکی، کاهش جنب و جوش مولکول ها باشد. برای H های کوچکتر نمی توان روند واضحی را پیدا کرد و با توجه به اثرات شدید محدودیت بر سیال، احتمال می رود که در این سامانه ها، سیال دچار انتقال فاز شده باشد. نکته دیگری که باید به آن توجه کرد، افزایش مقدار ضریب انتقال گرما با افزایش فاصله دو صفحه است که در شکل ها به خوبی پیداست.



شکل ۱: میانگین مولفه‌های افقی ضریب انتقال گرما در حفره‌های با ابعاد مختلف برحسب میدان الکتریکی

شایان ذکر است که برای مولفه عمودی ضریب انتقال گرما بر حسب میدان الکتریکی هیچ روند مشخصی مشاهده نشد و اختلاف ضریب انتقال گرما در سامانه‌های مختلف در حد خطای محاسبات و در نتیجه قابل چشم‌پوشی است. دلیل این عدم وابستگی را می‌توان به تغییرات اندک ساختار لایه‌ای سیال محدود شده در میدان‌های مختلف نسبت داد.

منابع و مراجع

- [1] Drexler, E. "Engines of creation: The coming era of nanotechnology"; Anchor, **1987**.
- [2] Saini, R.; Saini, S.; Sharma, S. *Journal of cutaneous and aesthetic surgery* **2010**, 3, 32.
- [3] Belkin, A.; Hubler, A.; Bezryadin, A. *Scientific reports* **2015**, 5, 8323.
- [4] Green, M. S. *The Journal of chemical physics* **1954**, 22, 398.
- [5] Kubo, R. *Journal of the physical society of Japan* **1957**, 12, 570.
- [6] Achari, P. F.; Bejagam, K. K.; Singh, S.; Deshmukh, S. A. *Computational Materials Science* **2019**, 161, 339.