Ж.А. Байтемирова, П.Ю. Цыба

Моделирование теплопроводности углеродной нанотрубки

(*Евразийский национальный университет им.Л.Н.Гумилева*)

Моделирование теплопроводности углеродной нанотрубки необходимо для управления тепловыми свойствами нанокомпозитов и наноэлектронных устройств. В работе вычисленно с помощью конечного метода для трехмерной анизотропной решетки, теплоемкость и ее температурного изменения.

Углеродные нанотрубки привлекли международное внимание с тех пор как были открыты японским физиком Ижимой С (Iijima S.) в 1991 г. Обширные исследования показывают, что этот новый нанокомпазитный материал может использоваться в конструкциях наномашин, наноэлектронике и в наномедицине из-за его очень высокой жесткости, упругости, и других необычных характеристиках [1,2]. Важное развитие мультимасштабных компьютерных методов моделирования, основанных на непрерывных моделях более реалистичен в квантовых и атомных масштабах [3]. Существует много технических проблем в экспериментальных исследованиях механических, тепловых и электрических свойств нанотрубки. Кроме того, в работе [4] анализируется возможность уменьшения коэффициента теплопроводности материалов построенных на основе или с использованием нанотрубок а полимерах.

Моделирование нанотепловых процессов, таких как теплопроводность и тепловое напряжение углеродной нанотрубки вызывает широкий интерес. Сложность структуры нанотрубок делает аналитический подход очень сложным, в то же время экспериментальные измерения являются очень дорогим и отнимающим много времени. Это делает моделирование наиболее подходящим и альтернативным видом исследования и анализа структуры углеродной нанотрубки и нанокомпозита [3]. Анализ конечного элемента был весьма успешен в моделировании явлений макромасштаба, таких как теплопроводность. В последние годы, было несколько интересных исследований в направлении непрерывных механических методов, чтобы изучить микромасштабные структуры и механические свойства [1].

В моделировании углеродной нанотрубки, молекулярный метод является дискретным, а метод конечного элемента является непрерывном методом. Анализ конечного элемента на наномасштабе отличается от этих методов. Фактически, анализ конечного элемента должен быть комбинацией этих двух методов.

Теплопроводность (K) углеродной нанотрубки является анизотропной, так как вдоль оси нанотрубки значение теплопроводности намного выше чем в других направлениях. Несмотря на то, что очень трудно получить экспериментальные данные теплопроводности, имеются экспериментальные данные тепловых свойств углеродной нанотрубки. Ученые исследовали экспериментально мезоскопические измерения теплопроводности фонона и теплоэлектрические явления в углеродной нанотрубке. Чтобы получить теплопроводность они измерили температурные распределения в отдельных многогранных углеродных нанотрубах с помощью термомикроскопа [5].

Общее уравнение одномерной теплопроводности может быть представлено в виде [6]

$$\rho c_\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(K_x \frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial x}\left(K_y \frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial}{\partial z}\right) + Qf(t,T) \tag{1}$$

где K_x, K_y, K_z - основные теплопроводность в направлениях x , y , z , ρ и c_ρ - соответственно, плотность и удельная теплопроводность. Q - норма образования тепла, и $f(t,T)$ является характеристикой выброса, которая является функцией от времени t и температуры T . T_∞ внешняя температура и T_* собственная температура системы, любую температуру можем представить таким образом $T = T_\infty + \Theta\Delta T$. Разность температуры очень мала $\Delta T = T_* - T_\infty << T_\infty$, соответственно $\Delta T =$1K. Отсюда, можно получить безразмерную температуру

$$\Theta = \frac{T - T_\infty}{T_* - T_\infty}. \tag{2}$$

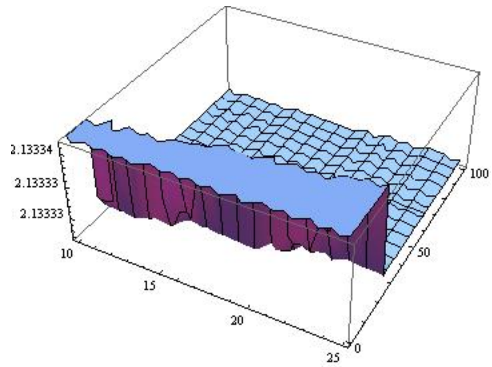

рисунок 1. Численное графическое решение

Для комнатной температуры $T_\infty = 300\,\mathrm{K}$ и собственная температура $T_* = T_\infty + 1 = 301\,\mathrm{K}$, можно показать что при $\Theta = 1$ температура $T = 301\,\mathrm{K}$, и $\Theta = 0$ температура $T = 300\,\mathrm{K}$. Фактически, можно выбрать любое температурное значение T чтобы безразмерная разность температуры была равна 1. Выбирая характеристическую длину L, теплопроводность $K_0 = 2500\,\mathrm{Вт/мК}$, и временные масштабы $\tau\ L^2\rho c_\rho/K_0$, общее уравнение в безразмерной форме приобретает вид

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t} = \nabla(k\nabla\Theta) + \lambda f(t,\Theta), \tag{3}$$

где $\lambda = QL^2/K_0(T_* - T_\infty)$ и $k = K_{ij}/K_0$ и зависимость от анизотропной теплопроводности в 3×3 матрице. Если нет теплопроводности тогда $Q = 0$ или $\lambda = 0$. Для однородного независящего от времени теплового источника $f(t,\Theta) = 1$. Поставляя $\Theta = \sum_{j=1}^{N} u_j(t)N_j(x,y)$ в уравнение (3) и после некоторых вычислений, формулировка конечного элемента обычно приводит к виду

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{F}, \tag{4}$$

и

$$\mathbf{u} = [u_1 v_1 \omega_1 u_2 v_2 \omega_2 ... u_n v_n \omega_n]^T, \tag{5}$$

где $\mathbf{M} = \int_\Omega N_i N_j d\Omega$, $\mathbf{K}$ коэффициент матрицы, $\mathbf{F}_i = \int_\Omega N_i N_j d\Omega$ источник теплопроводности и граничных условий.

Далее рассмотрим частный случай, когда $\mathbf{F}$ и $\mathbf{M}$ являются константами и решение уравнения (4)принимает вид

$$\mathbf{u} = \left(\frac{\mathbf{F}}{\mathbf{K}}\right) + \mathbf{c_2 e^{-\frac{K}{M}T}}. \tag{6}$$

Рассмотренный выше метод конечного элемента может быть использован для моделирования теплопроводности углеродной нанотрубки. Теплопроводность углеродной нанотрубки имеет анизотропные свойства. Численное графическое решение показано на рисунке 1.

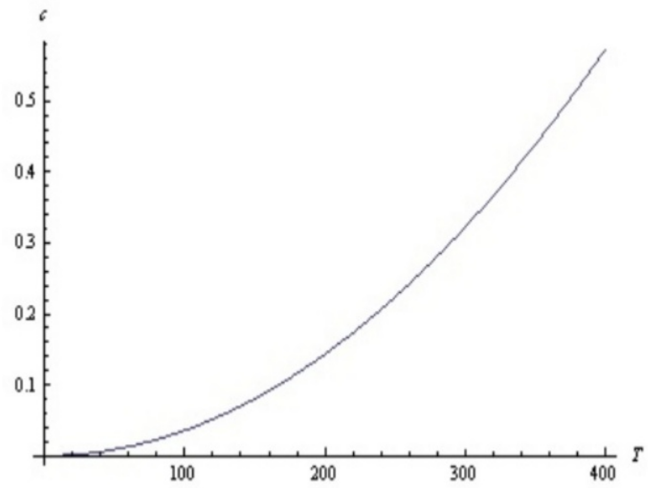

рисунок 2. Зависимость теплоемкости углеродной нанотрубки от температуры

Теплоемкость углеродной нанотрубки [7] определена как

$$c(T) = \int_0^{+\infty} c_q(\omega) p(\omega) d\omega, \tag{7}$$

$$c_q(\omega) = \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{exp(\hbar\omega/k_B T)}{[exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^2} \tag{8}$$

Здесь $c_q(\omega)$ является безразмерной теплоемкостью фононов с угловой частотой ω, $\hbar$ - постоянная Планка и k_B - постоянная Больцмана, а $p(\omega)$ это функция распределения Гиббса

$$p(\omega) = Aexp\left[-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right], \tag{9}$$

где А – нормировочная постоянная, которая равна $A = k_B T/\hbar$. Тогда (7) примет вид

$$c(T) = \int_0^{+\infty} \left(\frac{\hbar\omega^2}{k_B T}\right) [e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1]^{-2}. \tag{10}$$

Будем предполагать что $k_B > 0$, $\hbar > 0$, $T > 0$ тогда решение уравнения (10) примет вид

$$c(T) = \frac{T^2 k_B^2 \left(\pi^2 - 6\zeta(3)\right)}{3\hbar^2}. \tag{11}$$

Зависимость теплоемкости от температуры показана на рисунке 2.

В этой работе рассмотрен метод конечного элемента моделирующий наномаштабную теплопроводность углеродной нанотрубки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1.Arroyo M. and Belytschko T., An atomistic-based finite deformation for single layer crystalline films. J. Mech. Phys. Solids, 50, 1941-77(2002).

2.Belytschko T., Xiao S. P., Schatz G. C., Ruoff R. S., Atomistic simulations of nanotube fracture, Phys. Rev. B, 65, 235430 (2002).

3.Curtin W. A. and R. E. Miller, Atomistic/continuum coupling in computational materials science, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 11, R33-R68 (2003).

4.Мырзакулов Р., Ержанов К.К., Бауржанкызы Г., Байтемирова Ж.А. Теплопроводность

материалов, обладающих высокой механической прочностью на основе нанотрубок, Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент: Материалы 7-й международной научной конференции. - Караганда: Изд-во КарГУ, 2010.-287-290 с.
5.Small J. P., Shi L., Kim P., Mesoscopic thermal and thermoelectric measurements of individual carbon nanotubes, Solid State Comm., 127, 181-186 (2003).
6.Xin-She Yang. Modelling Heat Transfer of Carbon Nanotubes. http://arxiv.org/abs/1003.1882v1
7.Sahin Buyukdagli, Alexander V. Savin, and Bambi Hu. Computation of the temperature dependence of the heat capacity of complex molecular systems using random color noise. arxiv: 0804.0667v1 [physics.comp-ph]

Байтемирова Ж.А., Цыба П.Ю.

Көміртекті түтікшенің жылу өткігіштігін модельдеу

Көміртекті түтікшенің жылу өткізгіштігін модельдеу наномкомпозиттерді және наноэлектронды қондырғыларды жылулық басқару үшін қажет болып табылады. Жұмыста үш өлшемді анизотропиялық тор үшін ақырлы әдістің көмегімен көміртекті түтікшенің жылу өткізгіштігін және температуралық өзгеру сипатын қарастырдық.

Baitemirova Zh.A., Tsyba P.Yu.

Modelling heat conductivity of carbon nanotube

Modelling heat transfer of carbon nanotubes is important for the thermal management of nanotube-based composites and nanoelectronic device. In the article by using a finite element method for three-dimensional anisotropic heat transfer, considered the thermal capasity and temperature variations of a nanotube.

Поступила в редакцию 12.10.10

Рекомендована к печати 25.10.10