

Conductividad Térmica en Nanoestructuras

- Geraudys Mora Barzaga,^{1,2} Eduardo Bringa¹

¹CONICET

²Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales. Universidad Nacional de San Luis.

Las propiedades a la nanoescala de los materiales pueden tener una gran influencia en su comportamiento macroscópico, por ejemplo, la generación y acumulación de defectos, como la densidad, la porosidad y las interfaces, pueden cambiar sus propiedades térmicas. En este trabajo, utilizamos simulaciones de dinámica molecular (MD), como una herramienta para estudiar el transporte térmico por vibraciones en presencia de estos defectos. Para determinar la influencia de una interface en la conductividad térmica, consideramos dos nanopartículas cristalinas sin presión externa, sometidas a un gradiente de temperatura perpendicular a la superficie de contacto entre ellas, y determinamos la conductividad térmica, la resistencia de contacto y el radio de contacto (a_c) en función al radio de las nanopartículas (R). La resistencia de contacto en la interfaz aumenta linealmente con el radio de contacto entre las nanopartículas, lo que lleva a una disminución neta en la conductividad efectiva a medida que aumenta el tamaño de las nanopartículas. Un modelo basado en el radio de contacto entre dos nanopartículas permite explicar razonablemente los resultados numéricos obtenidos para la conductividad térmica, bien descrita por una dependencia con (a_c/R) . Se encontró que la conductancia térmica simulada es proporcional a (a_c/R) [1].

También hemos estudiado otros nanosistemas de interés tecnológico: nanocables (NWs) y nanotubos (NTs) de carbono amorfo (aC). Para estudiar la influencia de la densidad, la temperatura y la geometría en las propiedades térmicas, obtenemos y analizamos la conductividad térmica de NW y NT con un radio externo de 2 nm, utilizando el Environment-Dependent Interaction Potential (EDIP), revisado para aC. El comportamiento de la conductividad térmica con radios internos, temperatura y densidad (relacionado con diferentes niveles de hibridación sp^3) se compara con experimentos en películas delgadas, encontrando muy buen acuerdo. Para los NTs, se obtuvo un aumento en la conductividad a medida que se aumenta el radio interno, disminuyendo el grosor de la pared.

Referencias:

[1] Mora-Barzaga, G., Miranda, E. N., Bringa, E.M., *Molecular dynamics simulations of thermal conductivity between two nanoparticles in contact*, J. App. Phys. **127**, 224303 (2020). [DOI](#)