

# 単層カーボンナノチューブと周囲材料の界面熱抵抗

塩見淳一郎<sup>\*1</sup>, 五十嵐康弘<sup>\*2</sup>, 丸山茂夫<sup>\*3</sup>

## Thermal boundary conduction between a single-walled carbon nanotube and surrounding material

Junichiro SHIOMI<sup>\*4</sup>, Yasuhiro IGARASHI, and Shigeo MARUYAMA,

<sup>\*4</sup>Department of Mechanical Engineering, The University of Tokyo,  
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan.

The thermal boundary resistance between a single-walled carbon nanotube (SWNT) and surrounding argon has been investigated by using molecular dynamics simulations. With a non-stationary approach, the thermal boundary resistance was quantified for a wide range of temperatures and argon densities, which covers various argon phases i.e., gas, liquid, solid and supercritical phases. The results show that, when the surrounding argon is in fluid phase, thermal boundary resistance is determined by the local density of the argon layer adjacent to the SWNT independently of the phase. On the other hand, when the surrounding material is solid, the modal thermal energy transfer manifests, which contributes to the density effect on the thermal boundary resistance.

**Key Words** : Carbon nanotube, Thermal boundary resistance, Thermal boundary conductance, Molecular dynamics, Argon

### 1. 緒 言

単層カーボンナノチューブ (single-walled carbon nanotube, 以下 SWNT) の多岐に渡る優れた物性<sup>(1)</sup>の1つとして, その熱物性が挙げられる. SWNT は炭素原子間の強い共有結合による高いフォノン群速度及び, 擬一次元構造によるフォノン散乱の抑制効果により, 高い熱伝導率を有することが期待される<sup>(2,3)</sup>. また, 長いフォノン平均自由行程に起因する弾道フォノン輸送と拡散フォノン輸送が混在した非フーリエ熱伝導特性を示すことでも注目されている<sup>(4-11)</sup>. これらの優れた熱伝導特性を活かして, 界面熱材料や複合材料<sup>(12-15)</sup>などの多岐わたる熱工学的応用が提案されており, 多様な環境での伝熱特性の検証が求められている. 加えて, 伝熱特性の理解は, 電子デバイス応用においても, 許容電力やジュール発熱下での性能を予測する上で重要である.

近年, SWNT の高い熱伝導性能が報告される中<sup>(2,3)</sup>, 実際の工学的応用を念頭に置いた場合, 熱源および除熱

源と SWNT の間の界面熱抵抗がデバイスの性能に大きく影響すると予想される<sup>(15-17)</sup>. 本報では界面熱抵抗  $R$  の逆数( $1/R$ )である界面熱コンダクタンス( $K$ )として表現を統一する. 特に, 複合材を始めとするバルク応用を念頭に置いた場合, SWNT と周囲物質との界面における熱輸送の理解が重要となる. しかし, これらに関する報告は, 古典分子動力学 (Molecular Dynamics, 以下 MD) 法を用いて, SWNT とその周囲に配置したメタンとの界面熱コンダクタンスのサイズ効果を議論したもの<sup>(8)</sup>などの数例に限られる. 界面熱コンダクタンスは, 界面の分子構造及び動力学特性に強く依存するため, 周囲材料の状態及びその相に影響されると考えられるが, それらを取り扱った研究はない.

そこで, 本研究では, 非定常古典 MD 法を用いて, SWNT と周囲材料の間の界面熱コンダクタンスの周囲材料の状態への依存性を定量的に評価する. 周囲材料を, Lennard-Jones (LJ)ポテンシャルで簡単に記述できるアルゴンとすることで, 計算負荷を軽減し幅広い密度及び温度領域での解析を実現する. これによって, 周囲アルゴンの全ての相状態 (気体, 気液混合, 液体, 固体, 超臨界) を網羅することが可能となる. さらに, 周囲材料が固体の場合に関して, 極低温での擬似的な解析を行い, 界面熱コンダクタンスのメカニズムを考察する.

\*原稿受付 2009年月日.

<sup>\*1</sup>正員, 東京大学大学院工学系研究科 (〒113-8656 文京区本郷 7-3-1)

<sup>\*2</sup>東京大学大学院工学系研究科

<sup>\*3</sup>正員, フェロー, 東京大学大学院工学系研究科

E-mail : maruyama@photon.t.u.tokyo.ac.jp

## 記 号

$\varepsilon$	:	ポテンシャルパラメータ
$\sigma$	:	ポテンシャルパラメータ
$B_{ij}^*$	:	結合価関数
$b$	:	ポテンシャルパラメータ
$D_e$	:	結合エネルギー
$R$	:	界面熱抵抗(1/K)
$R_e$	:	平衡原子間距離
$r_{ij}$	:	原子 <i>i</i> と原子 <i>j</i> 間の距離
$f$	:	カットオフ関数
$S$	:	ポテンシャルパラメータ
$\beta$	:	ポテンシャルパラメータ
$\delta$	:	ポテンシャルパラメータ
$T$	:	温度
$\rho$	:	密度
$K$	:	界面熱コンダクタンス(1/R)
$\lambda$	:	熱伝導率
$L$	:	ナノチューブ長
$k_B$	:	ボルツマン定数

## 2. 計 算

**2・1 ポテンシャル関数** 単層カーボンナノチューブを構成する炭素の原子間相互作用として、Terstoff が考案した多体間ポテンシャル<sup>(19)</sup>を改良した Brenner ポテンシャル<sup>(20)</sup>を採用し、共役項を無視して簡易化して用いた<sup>(21)</sup>。このポテンシャルは、SWNT のフォノンの分散関係を良く再現することが確認されている<sup>(4,7)</sup>。

系全体のポテンシャル  $E_b$  は各原子間の結合エネルギーの総和により次のように表される。

$$E_b = \sum_i \sum_{j(i>j)} V_R(r_{ij}) - B_{ij}^* V_A(r_{ij}) \quad (1)$$

ここで、 $V_R(r)$  と  $V_A(r)$  はそれぞれ反発力項と引力項であり、以下に示すようにカットオフ関数  $f(r)$  を含む Morse 型の指数関数が用いられている。

$$V_R(r) = f(r) \frac{D_e}{S-1} \exp\left\{-\beta\sqrt{2S}(r-R_e)\right\} \quad (2)$$

$$f(r) = \begin{cases} 1 & (r < R_1) \\ \frac{1}{2} \left( 1 + \cos \frac{r-R_1}{R_2-R_1} \right) \pi & (R_1 < r < R_2) \\ 0 & (r > R_2) \end{cases} \quad (3)$$

$B^*$  は結合  $ij$  と隣り合う結合  $jk$  との角度  $\theta_{jk}$  の関数で、結合状態を表すように引力項の係数となっている。

$$B_{ij}^* = \frac{B_{ij} + B_{ji}}{2} \quad (4)$$

$$B_{ij} = \left( 1 + \sum_{k(\neq i,j)} [G_c(\theta_{ijk}) f(r_{ik})] \right)^{-\delta} \quad (5)$$

$$G_c(\theta) = a_0 \left( 1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta)^2} \right) \quad (6)$$

**Brenner** ポテンシャルには、炭素原子間距離に重点を置いたパラメータ **I** と、炭素間に作用する力の定数に重点を置き最適化されたパラメータ **II** が存在する<sup>(20)</sup>。本研究では界面における熱伝導特性を調べるため、フォノンの分散関係の精度を重視し、パラメータ **II** を用いて計算を行った。

周囲材料としては van der Waals 力のみを考慮した LJ 原子系を用いた。単純な系を採用することで、計算負荷が軽減され、幅広い周囲材料の状態をマッピングすることが可能となる。LJ ポテンシャルは、2 原子間の距離  $r$  の一価関数として以下のように表される。

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left\{ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (7)$$

本研究ではアルゴンのパラメータを用いて計算を行う。各パラメータの値を表 1 に示す。以下では温度及び密度を無次元化して表記する。

$$\rho^* = \frac{\rho\sigma^3}{m}, \quad T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon} \quad (8)$$

計算セルに 3 次元周期境界条件を課し、カットオフ距離を  $3.5\sigma$  とした。運動方程式の積分には速度 Verlet

TABLE 1. Lennard-Jones potential parameters.

	ε[J]	σ[Å]
Ar-Ar	$1.654 \times 10^{21}$	3.40
C-Ar	$7.975 \times 10^{22}$	3.385

アルゴリズムを採用した。時間ステップは、炭素原子の最大振動周波数（凡そ 50 THz）に比べて十分小さい 0.5 fs として計算を行った。加熱時（2.3 節参照）以外はマイクロカノニカルアンサンブルに基づき計算を行った。

**2・2 温度制御法** 運動エネルギーがボルツマン分布を満たすものとし、温度を以下のように定義した。

$$T = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N |\mathbf{v}_i|^2 \quad (9)$$

式中の  $N$  は対象とする原子数、 $\mathbf{v}_i$  は  $i$  番目の原子の速度ベクトルである。温度制御法には、Berendsen の速度スケールリング法<sup>(2)</sup>を用いた。

$$\mathbf{v}_i' = \mathbf{v}_i \sqrt{\frac{\gamma T_c + (1-\gamma)T}{T}} \quad (10)$$

ここで、 $T_c$  は目標温度、 $\gamma$  は温度制御の緩和時間を定めるパラメータである。本研究では、界面熱コンダクタンスを測定する前にパルス的な加熱を用いることから、急激な温度制御によって系全体の構造が不自然になることを避けるため  $\gamma = 0.6$  を用いて温度制御を行った。なお、温度制御は 0.1 ps に 1 回の頻度で行った。

**2. 3 計算手順** カイラリティ(5, 5) (直径 6.9

Å), 長さ 50.2 Å の SWNT (炭素原子数 400) を計算セルの中心に  $z$  軸方向に沿って置き、その周囲に  $N_A$  個のアルゴン原子を fcc 格子状に配置する。バルク of アルゴンの相図<sup>(23)</sup>を基に、 $T^* = 1.0, 1.2$ , または 2.5 の等温線上で、アルゴンが幅広い相を取るように密度を設定した。バルクのアルゴンにおいては  $T^* = 1.0$  及び 1.2 では相変化が起こり、 $T^* = 2.5$  では超臨界流体となる。なお、この設定温度は初期の平衡状態での温度であり、後述のように SWNT を加熱した後は、マイクロカノニカルアンサンブルを採用していることより、収束する温度はそれとは別のもことになる。図 1 に、密度  $\rho^* = 0.04, 0.20, 0.60$  の場合の初期条件における原子配置を示す。密度を変える際は、密度によらず計算量を一定に保つため、 $N_A$  をほぼ一定に保ち体積を変化させた。

上述のように初期条件を設定した後、系全体に速度スケールリング法による温度制御を加えて任意の温度に保った上で、100 ~ 400 ps 程かけて平衡状態を達成した。その後、SWNT のみを上述の温度制御法を用いて約  $2T_0^*$  に 10ps の間加熱した。ここで、 $T_0^*$  はそれぞれの計算条件における初期温度である。その後、すべての温度制御を停止して、マイクロカノニカルアンサンブル下で熱緩和を観察し、SWNT とアルゴンの温度差が十分に小さくなった時点で計算を終了した。以上の工程によって得られた典型的な SWNT 及びアルゴンの温度の時系列を  $T^* = 1.0, \rho^* = 0.60$  の場合を例に取り図 2 に示す。

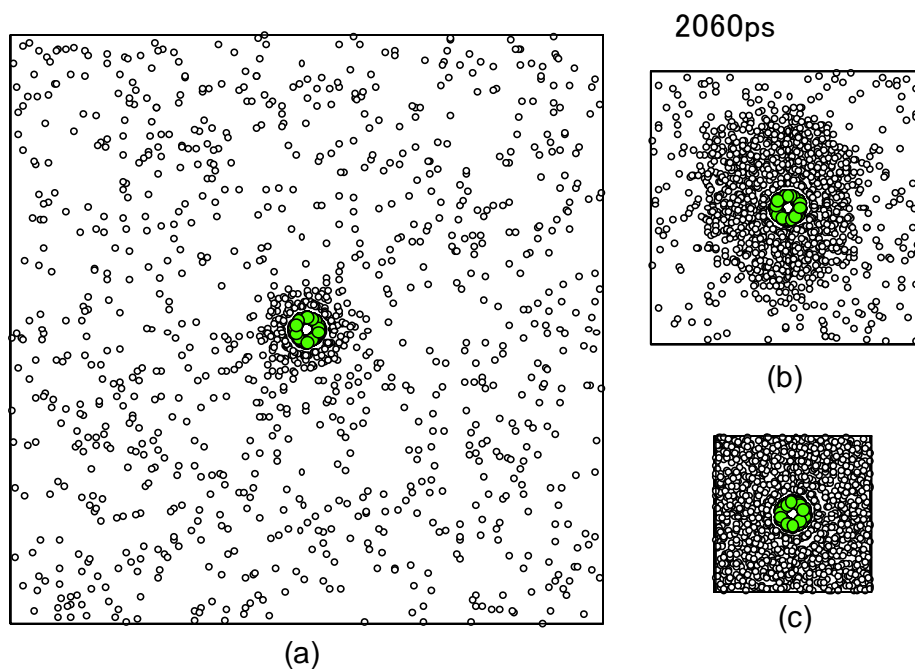


Fig. 1 Typical instantaneous pictures of equilibrated systems with different densities; (a)  $\rho^* = 0.04$ , (b) 0.20 and (c) 0.60.

Table 2 Parameters for thermal boundary conductance calculations.

$A$ [nm <sup>2</sup> ]	$M_a$ [kg]	$c_a$ [J/K·kg]	$M_b$ [kg]	$c_b$ [J/K·kg]
18.0	$3.83 \times 10^{22}$	1000	LJ分子数に依存	312

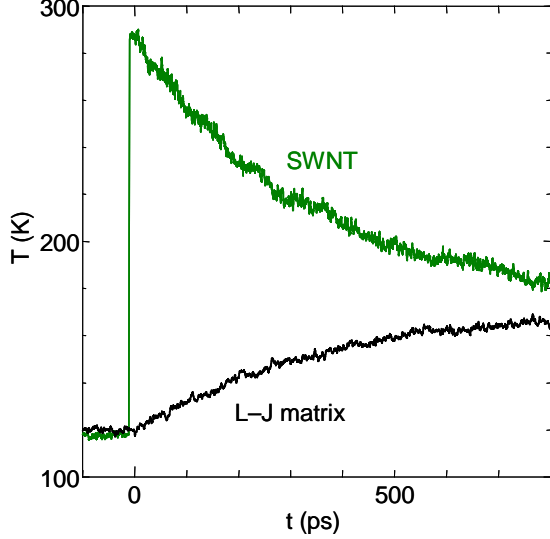


Fig. 2 Temperature histories of an SWNT and surrounding Lennard-Jones (argon) molecules. The SWNT is pulse heated at  $t=0$ .

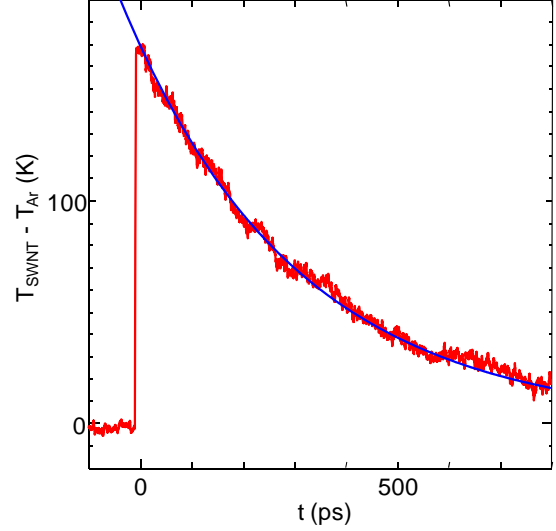


Fig. 3 Time history of the temperature difference of an SWNT and surrounding Lennard-Jones (argon) molecules. The solid line is the fitted exponential curve.

**2. 4 界面熱コンダクタンス計算** 本研究では、非定常古典 MD 計算結果に集中熱容量法を適用することによって界面熱コンダクタンスを計算した。ここで、内部熱伝導率と界面熱コンダクタンスの比からなるビオ数は、

$$Bi = \frac{KL}{\lambda} \quad (11)$$

となり、仮に SWNT の内部熱伝導率  $\lambda$  を 1000 W/mK、界面熱コンダクタンス  $K$  を 10 W/m<sup>2</sup>K、SWNT 長さ  $L$  を 10 nm とすると、 $Bi = 1 \times 10^{-10}$  と十分小さくなるため、内部の温度勾配が無視でき集中熱容量法の適用が可能である。

集中熱容量法を本計算系に適用した場合、SWNT とアルゴンの温度差は以下の様に記述できる。

$$\frac{d(T_a - T_b)}{dt} = - \left( \frac{1}{c_a M_a} + \frac{1}{c_b M_b} \right) KA (T_a - T_b) \quad (12)$$

この微分方程式を解くと、

$$T_a - T_b = \Delta T \exp \left\{ - \left( \frac{1}{c_a M_a} + \frac{1}{c_b M_b} \right) KSt \right\} \quad (13)$$

となる。ここで、式中の  $\Delta T$ 、 $c$ 、 $M$  は積分定数、比熱、

質量であり、添え字の  $a$  と  $b$  は SWNT とアルゴンを表す。接触面積  $A$  は、SWNT の最近接アルゴン層と SWNT の中間を側面とする円柱の側面積で定義した。

$$A = \pi L (d_{SWNT} + \sigma_{C-Ar}) \quad (14)$$

ここで、 $\sigma_{C-Ar}$  は炭素-アルゴン間のポテンシャルパラメータである (表 1)。

図 3 に、 $T^* = 1.0$ 、 $\rho^* = 0.60$  の場合を例に取り、SWNT とアルゴンの温度差の時系列を示す。図 3 に見られるように温度差の緩和を指数関数でフィッティングすることによって、式(13)の時定数を求め、界面熱コンダクタンス  $K$  を計算する。その際に用いる物性値を表 2 に示す。

### 3. 計算結果および考察

**3. 1 界面熱コンダクタンスの密度依存性** 図 4 に界面熱コンダクタンスのアルゴンの平均密度への依存性を示す。超臨界流体においては、密度と界面熱コンダクタンスの関係がおおよそ線形になる。また、 $T^* = 1.0, 1.2$  においても、気相アルゴンの場合の界面熱コンダクタンスは、超臨界の場合と同様にほぼ直線上

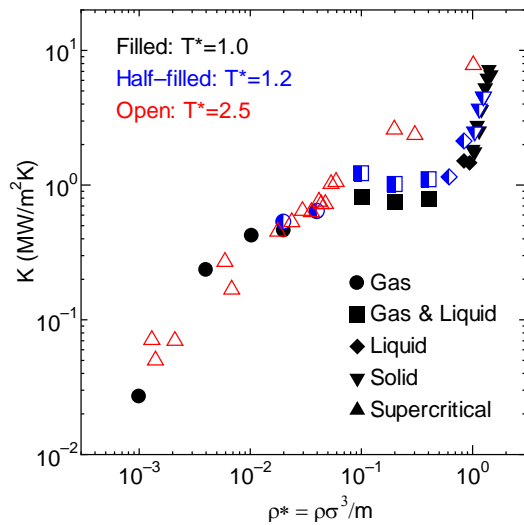


Fig. 4 Temperature and density dependences of the thermal boundary conductance  $K$ .

にデータが並ぶ。しかし、凝縮が生じて気液2相になる密度では、密度が増加しても界面熱コンダクタンスは増加せず、ほぼ一定の値をとる。さらに密度が増加し、計算領域全体が液相となると界面熱コンダクタンスは再び上昇する。特に、固相では、他の相に比べて界面熱コンダクタンスが密度に対してより敏感であることが、グラフの傾きよりわかる。なお、図4における相境界はバルクのアルゴンの相図<sup>23)</sup>から判断しているため、実際のSWNTとの界面を有する系のものとは若干異なるが、本稿での密度依存性に関する議論には影響しない。

次に、上述の界面熱コンダクタンスの密度依存性を理解するために、界面近傍のアルゴン原子の動的構造の界面熱コンダクタンスへの影響を考える。図1で示したように、アルゴンの相によらずSWNT近傍でアルゴンは層構造を形成する。そこで、この吸着層の形成と界面熱コンダクタンスとの因果関係を明らかにするべく、各計算条件におけるSWNTの中心軸からの距離に対するアルゴンの密度分布関数を計算した。その結果、図5に見られるように、気相(破線)や液相(実線)では平均密度( $\rho^*$ )の変化に応じて分布が変化するのに対し、気液2相(点線)の条件では $\rho^*$ を変化させた3つの分布がほぼ重なっており、気液2相においては $\rho^*$ の変化がSWNT近傍のアルゴンの密度分布関数に影響しないことが分かる。図1の原子配置と併せて考えると、気相アルゴンにおいては $\rho^*$ の増加に伴い、SWNT近傍のアルゴン局所密度も増加するが、アルゴンが一部凝縮し始めると、それ以上の密度上昇は

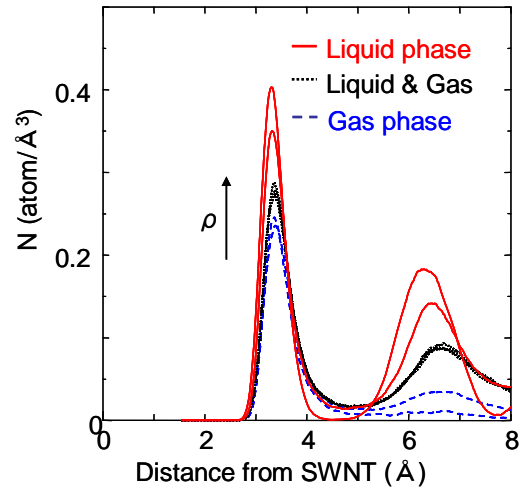


Fig. 5 Density distribution function of argon as a function of the distance from the SWNT axis.

計算セルの中で液相の占める割合を増加させるばかりで、SWNT近傍のアルゴンの局所密度自体は変化しないことがわかる。

以上の結果及び考察を踏まえて、界面熱コンダクタンス( $K$ )とSWNT近傍のアルゴンの局所数密度( $N_1$ )を比較した結果を図6に示す。ここでは、相変化が生じる代表的なデータとして $T^* = 1.0$ の場合についてのみ示す。 $N_1$ はSWNTからの距離が2-5 Åの範囲のピーク値(図5)を基に計算した。気相から液相にかけて、 $N_1$ と $K$ の $\rho^*$ への依存性が良く一致することが見て取れる。従って、この密度領域においてはSWNT近傍に形成するアルゴン層の局所密度が界面熱コンダクタンスを決定する直接的な因子であることがわかる。一方、密度が最も高い領域( $\rho^* > 1$ )においては、密度とともに

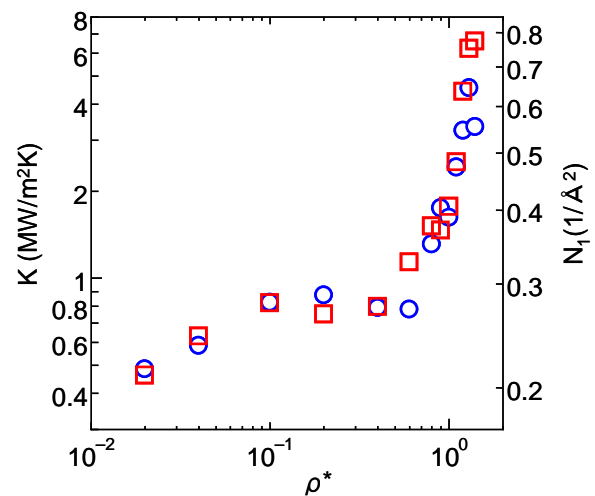


Fig. 6 Dependence of the thermal conductance  $K$  (squares) and local density  $N_1$  (circles) on the global density  $\rho^*$ .

に界面熱コンダクタンスが上昇するという定性的な傾向は変わらないものの、密度に対する感度が増大することが見て取れる。従って、この領域においては異なる熱輸送のメカニズムが存在する可能性が示唆される。

**3. 2 固体界面での熱輸送メカニズム** 前節で観察された界面熱コンダクタンスと SWNT 近傍のアルゴンの局所密度の高い相間は、界面での熱輸送を担う原子数によって界面熱コンダクタンスが決定されることを示唆する。一方、図 6 からわかるように、密度が最も高い領域においては、界面熱コンダクタンスと SWNT 近傍のアルゴン局所密度の関係に変化が生じる。この要因の 1 つとして、高密度領域において増大されると考えられる密度の界面分子の動力学への影響が挙げられる。特に周囲材料が固体の場合は、密度は周囲材料の振動モードに大きく影響し、延いては SWNT と周囲材料との間のエネルギーの受容性に影響する<sup>(24)</sup>と考えられる。

同様の考え方を基に、Shenogen<sup>(18)</sup>は周囲材料がメタンの場合の MD 解析を行い、格子振動エネルギーは周波数を保存して弾性的に SWNT から周囲材料へ輸送され、界面熱コンダクタンスがそれぞれの格子振動の重なり積分によって求まることを提唱している。しかし、振動モードごとのエネルギー輸送を実際に可視化した解析は未だに報告されていない。そこでここでは、擬似的な非定常古典 MD 解析を用いて振動モードごとのエネルギー伝達を評価し、それに対する周囲材料の密度の影響を検証した。

まず、室温での平衡状態を初期条件として、系を準平衡状態に保ちながら制御温度を徐々に 0 K まで下げることで、 $\mathbf{v}_i = \mathbf{0}$  の最安定状態を構築した。その後、SWNT を 300 K に加熱して界面熱輸送を促した。このように、加熱前の固体アルゴンの運動エネルギーを小さくすることで、SWNT からアルゴンへの熱輸送により励起された振動成分を可視化することが可能となる。つまり、SWNT から固体アルゴンへの熱輸送を司る振動成分を明確に抽出できる。

以上の計算から得られた各原子の速度履歴を基に格子振動のスペクトル解析を行った。SWNT に関しては SWNT 内の全原子、アルゴンに関しては SWNT 近傍のアルゴン一層に含まれる原子に対して、それぞれパワースペクトルを計算し平均したものを図 7 に示す。図 7a に示したのが SWNT を加熱した直後のアルゴンの振動スペクトルである。平衡状態のアルゴン<sup>24)</sup>には見られない鋭いピークが幾つか見られ、SWNT からアルゴンへの界面熱輸送に由来するものと思われる。こ

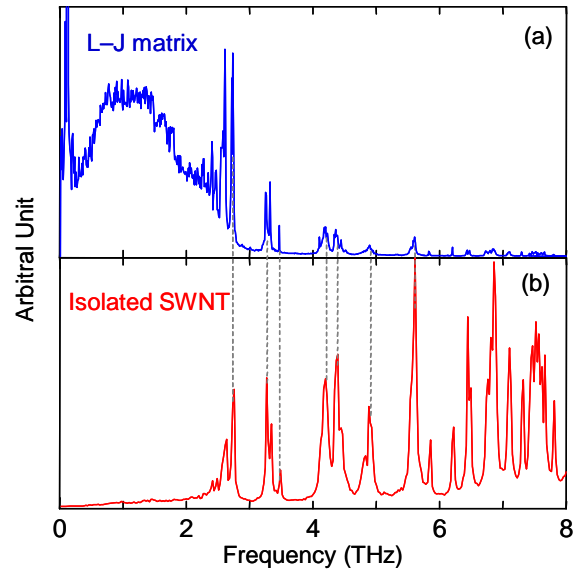


Fig. 7 Lattice vibrational spectra of (a) LJ (argon) matrix surrounding an SWNT heated up to 300 K from 0 K, (b) an isolated SWNT equilibrated at 300 K.

これらのピークの位置を真空中の SWNT の平衡振動スペクトル (図 7b) と比べると、界面熱輸送によって励起されたアルゴンの振動のピークが SWNT の固有振動モードと一致することが見て取れる。また、励起の程度は周波数に依存し、SWNT とアルゴンのスペクトルが重なる周波数領域ではそれ以外の領域よりも、励起が強いことがわかる。これは、界面熱コンダクタンスが 2 つの格子振動の重なり積分によって決定するとして Shenogen<sup>(18)</sup>の考察と一致する傾向を示している。

密度が上昇すると、固体アルゴンの最大振動数は増加し、振動スペクトルは高周波数側にシフトする。これと上述の重なり積分の概念を併せると、SWNT とのエネルギー授受を担う振動モードの数がアルゴンの密度とともに増加することで、密度の増加と伴に界面熱コンダクタンスが増大すると考えられる。

#### 4. 結 論

古典分子動力学法を用いて SWNT と Lennard-Jones (アルゴン) 原子より成る周囲材料の間の界面熱コンダクタンスを、温度・周囲材料密度を変えて計算した。アルゴンの密度が界面熱コンダクタンスに大きな影響を与え、その値は  $0.01 \sim 10 \text{ MW/m}^2\text{K}$  となることがわかった。また、アルゴンが流体相の場合は、界面熱コンダクタンスとアルゴン吸着層の局所分子密度に高い相関があることが明らかになった。さらに、アルゴンが

固体の場合の擬似的な非定常 MD シミュレーション及び振動スペクトル解析より、SWNT から周囲のアルゴンへの弾性的な熱輸送を観察した。本結果は、界面熱コンダクタンスを SWNT と周囲材料の振動スペクトルの重なり積分によって説明した理論<sup>(18)</sup>と定性的に一致する。

## 謝 辞

この研究の一部は科学研究費補助金 (#19860022, #19206024, 及び特定領域研究「配列ナノ空間を利用した新物質科学」) により行なわれた。記して謝意を表す。

## 文 献

- (1) Saito, R., Dresselhaus, G., and Dresselhaus, M. S., Physical properties of carbon nanotubes, Imperial College Press, (1998).
- (2) Yu, C., Shi, L., Yao, Z., Li, D., and Majumdar, A., Thermal conductance and thermopower of an individual single-walled carbon nanotube, *Nano Letters*, **5**, (2005), 1842.
- (3) Pop, E., Mann, D., Wang, Q., Goodson, K., and Dai, H., Thermal conductance of an individual single-walled carbon nanotube above room temperature, *Nano Letters*, **6**, (2006), 96.
- (4) Maruyama, S., A molecular dynamics simulation of heat conduction in finite length SWNTs, *Physica B*, **323**, (2002), 193.
- (5) Maruyama, S., A molecular dynamics simulation of heat conduction of a finite length single-walled carbon nanotube, *Microscale Thermophysical Engineering*, **7**, (2003), 41.
- (6) Livi, R. and Lepri, S., Heat in one dimension, *Nature*, **421**, (2003), 327.
- (7) Shiomi, J., and Maruyama, S., Heat conduction of single-walled carbon nanotube isotope superlattice structures: A molecular dynamics study, *Physical Review B*, **74**, (2006), 155401.
- (8) Shiomi, J., and Maruyama, S., Non-Fourier heat conduction in a single-walled carbon nanotube: classical molecular dynamics simulations, *Physical Review B*, **73**, (2006), 205420.
- (9) Mingo, N., and Broido, D. A., Length dependence of carbon nanotube thermal conductivity and the “problem of long waves”, *Nano Letters*, **5**, (2005), 1221.
- (10) Shiomi, J., and Maruyama, S., Molecular dynamics of diffusive-ballistic heat conduction in single-walled carbon nanotubes, *Japanese Journal of Applied Physics*, **47**, (2008), 2005.
- (11) Yamamoto, T., Konabe, S., Shiomi, J., and Maruyama, S., Crossover from ballistic to diffusive thermal transport in carbon nanotubes, *Applied Physics Express*, **2**, (2009), 095003.
- (12) Biercuk, M. J., Llaguno, M. C., Radosavljevic, M., Hyun, J. K., and Johnson, A. T., Carbon nanotube composites for thermal management, *Applied Physics Letters*, **80**, (2002), 2767.
- (13) Choi, S. U. S., Zhang, Z. G., Yu, W., Lockwood, F. E., and Grulke, E. A., Anomalous thermal conductivity enhancement in nanotube suspensions, *Applied Physics Letters*, **79** (2001), 2252.
- (14) Huxtable, S. T., Cahill, D. G., Shenogin, S., Xue, L., Ozisik, R., Barone, P., Usrey, M., Strano, M. S., Siddons, G., Shim, and M., Keblinski, P., Interfacial heat flow in carbon nanotube suspensions, *Nature Materials*, **2**, (2003), 731.
- (15) Duong, H. M., Yamamoto, N., Papavassiliou, D. V., Maruyama, S., and Wardle, B. L., Inter-carbon nanotube contact in thermal transport of controlled-morphology polymer nanocomposites, *Nanotechnology*, **20**, (2009), 155702.
- (16) Duong, H. M., Papavassiliou, D. V., Mullen, K. J., Wardle, B. L., and Maruyama, S., A numerical study on the effective thermal conductivity of biological fluids containing single-walled carbon nanotubes, *International Journal of Heat Mass Transfer*, **52**, (2009), 5591.
- (17) Maruyama, S., Igarashi, Y., Taniguchi, Y., and Shiomi, J., Anisotropic heat transfer of single-walled carbon nanotubes, *Journal of Thermal Science and Technology*, **1**, (2006), 138.
- (18) Shenogin, S., Xue, L., Ozisik, R., Keblinski, P., and Cahill, D. G., Role of thermal boundary resistance on the heat flow in carbon-nanotube composites, *Journal of Applied Physics*, **95**, (2004), 8136.
- (19) Tersoff, J., New empirical model for the structural properties of silicon, *Physical Review Letters*, **56**, (1986), 632.

- (20) Brenner, D. W., Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films, *Physical Review B*, **42**, (1990), 9458.
- (21) Yamaguchi, Y., and Maruyama, S., A molecular dynamics simulation of the fullerene formation process, *Chemical Physics Letters*, **286**, (1998), 336.
- (22) Berendsen, H. J. C., Postma, J. P. M., van Gunsteren, W. F., DiNola, A., and Haak, J. R., *Journal of Chemical Physics*, **81**, (1984), 3684.
- (23) Hansen, J. P., and Verlet, L., Phase transitions of the Lennard-Jones system, *Physical Review*, **184**, (1969), 151.
- (24) Carlborg, C. F., Shiomi J., and Maruyama, S., Thermal boundary resistance between single-walled carbon nanotubes and surrounding matrices, *Physical Review B*, **78**, (2008), 205406.