

PERCOLACION ELECTRICA EN MATRICES 2-D Y 3-D DE MATERIALES COMPUESTOS AISLANTES CON UNA FASE CONDUCTORA

Andrés Concha^(a), Raúl Quijada^{(a)(b)}, Rodrigo Soto^(c), Sergio Rica^(c) y Mauricio E. Pilleux^(d)

(a) Departamento de Ingeniería Química; (b) Centro Para la Investigación Interdisciplinaria en Ciencia de los Materiales; (c) Departamento de Física; (d) IDIEM (mpilleux@idiem.uchile.cl); Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Beauchef 850, Santiago 6511226, Chile.

RESUMEN

Se presentan los cálculos numéricos del límite de percolación y del exponente crítico para sistemas no universales en 2-D y 3-D utilizando un modelo generalizado de condensadores y resistencias en redes cúbicas. En redes 2-D en régimen estacionario con un modelo universal, se encontró que el límite de percolación es 0,50(1), lo cual está en concordancia con lo indicado en la literatura. Para el caso 3-D con el modelo universal se obtuvo un límite de percolación de 0,2452(5) y un exponente crítico de la conductividad de 0,22, lo que está en concordancia con resultados obtenidos en simulaciones masivas. Adicionalmente, se implementó una variante no universal en la cual ambos materiales tienen resistencias no nulas, encontrando que sólo es posible describir al sistema utilizando exponentes críticos si la razón entre las conductividades es mayor que $\approx 10^6$. A menores razones de conductividad no se observa una transición brusca aislador-conductor. El modelo utilizado recupera el modelo universal cuando el medio aislador tiene conductividad nula. Se estudió, además, la respuesta del sistema a un potencial periódico, obteniendo una curva maestra para este tipo de materiales para un espectro amplio de frecuencias, verificando que la conducción eléctrica a alta frecuencia es dominada por los condensadores. Finalmente, se mostró que cambios morfológicos en las partículas conductoras pueden modificar drásticamente el límite de percolación de los sistemas compuestos, lo cual concuerda con datos experimentales recientes, y entrega una posible respuesta al amplio espectro de límites de percolación reportados en la literatura.

Palabras claves: Metalurgia, materiales, congreso, materiales compuestos, percolación, conductividad.

1. INTRODUCCION

Los sistemas heterogéneos han mostrado poseer características singulares en las mas variadas áreas de la ciencia de los materiales. Es así como este tipo de sistemas, continua recibiendo atención para calcular propiedades macroscópicas [1-37]. Los numerosos resultados y técnicas empleadas han mostrado que su estudio, en general, no es simple y está lejos de estar resuelto, más bien existe una colección de resultados particulares que distan mucho de formar un cuerpo ordenado y sólido de conocimientos. Sin embargo, existe una clasificación simple que es posible realizar en este tipo de sistemas que, en general, muestra fuertes diferencias en los comportamientos de las cantidades físicas medibles de interés. Esta clasificación se basa en el concepto de orden. En efecto, es bien sabido que el comportamiento de un material desordenado espacialmente difiere fuertemente de los de un sistema ordenado. Un ejemplo típico es el de la pérdida de las bandas de conducción en un sólido

cristalino a medida que la posición de los átomos en la red es perturbada aleatoriamente y aumenta el desorden [4].

En particular, el problema que se estudiará en este trabajo es conocido como percolación [1-37]. Este termino está asociado a variados problemas de diversas áreas del conocimiento como la activación de conducción en semiconductores, sistemas compuestos aislador-conductor, ruptura dieléctrica, mecánica de fluidos en medios porosos, microemulsiones e incluso el estudio de patrones de crecimiento urbano [2,5-9].

En términos generales, se considera que el sistema compuesto es generado mediante un sorteo aleatorio, es decir, es un sistema discretizado al que se le asignan propiedades físicas a cada una de las celdas, eligiendo al azar el valor de cada una de ellos desde un conjunto disponible de valores (en el caso más simple se puede considerar un sistema de dos fases). Por ejemplo, en el estudio de percolación en el campo de la fluidodinámica, se ha considerado una arena compuesta de dominios sólidos y otros sectores que son accesibles por un

sistema a un estímulo periódico para el caso en que se consideran la constante dieléctrica del medio y la conductividad finita de las partículas, obteniendo una curva maestra para este tipo de materiales para un espectro amplio de frecuencias.

Finalmente, se mostró que cambios morfológicos en las partículas pueden modificar drásticamente el límite de percolación de los sistemas compuestos, lo cual se encuentra en perfecta concordancia con datos experimentales recientes [27].

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue posible gracias al apoyo de Fundación Andes (proyecto C-13680/5), al proyecto FONDECYT 1020359 y al proyecto FONDAP 11980002. Además, los autores desean agradecer al Prof. Víctor Fuenzalida por facilitarnos sus instalaciones para realizar los cálculos computacionales.

REFERENCIAS

1. R.J. Elliot, J.A. Krumhansl y P.L. Leath, *Rev. Mod. Phys.*, 46 (1974) 465.
2. S. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.*, 45 (1973) 574-588.
3. R.L. Landauer, *J. Appl. Phys.*, 23 (1952) 779-784.
4. N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid State Physics*, CBS Publishing Asia Ltd., Hong Kong, 1987.
5. D. Stauffer y A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2ª ed., Taylor y Francis, Londres, 1994.
6. B.J. Last y D.J. Thouless, *Phys. Rev. Lett.*, 27 (1971) 1719-1721.
7. T. Tanamoto y A. Toriumi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 36 (1997) 1439-1442.
8. J.S. Andrade, M.P. Almeida, J.H. Filho, S. Havlin, B. Suki y H.E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.*, 79 (1997) 3901-3905.
9. I. Zivic, S. Milosevic y H.E. Stanley, *Phys. Rev E*, 58 (1998) 5376-5381.
10. S. Feng, B.I. Halperin y P.N. Sen, *Phys. Rev. B*, 35 (1987) 197-214.
11. G.G. Batrouni, A. Hansen y B. Larson, *Phys. Rev. E*, 53 (1996) 2292-2297.
12. P.G. de Gennes, *J. Phys. (Paris)*, 37 (1976) L-1.
13. D.A. Willming y C.H. Wu, *J. Appl. Phys.*, 63 (1988) 456-459.
14. Y. Meir, A. Aharony y B. Harris, *Europhys. Lett.*, 10 (1989) 275-278.
15. D. Stroud, *Superlatt. Microstruct.* 23 (1998) 567-573.
16. F.A.T. Ramdeen y R.M. Hill, *Phys. Stat. Sol. A*, 213 (1999) 391-395.
17. V. J. Ervin, J. W. Klett y Chad M. Mundt, *J. Mater. Sci.* 34 (1999) 3545-3553.
18. H.-P. Hsu, S.C. Lin, y C.-K. Hu, *Phys. Rev. E*, 64 (2001) 016127.
19. S. Banerjee y D. Chakravorty, *J. Appl. Phys.*, 85 (1999) 3623-3625.
20. Y. Ishigure, S. Iijima, H. Ito, T. Ota, H. Unuma, M. Takahashi, Y. Hikish y H. Suzuki, *J. Mater. Sci.*, 34 (1999) 2979-2985.
21. H.-G. Busmann, B. Günther y U. Meyer, *Nanostruct. Mater.*, 12 (1999) 531.
22. X.H. Yin, K. Yoshino, H. Yamamoto, T. Watanuki, I. Isa, S. Nakagawa y M. Adachi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Pt. 1, 35 (1996) 4692-4695.
23. W.B. Genetti, B.P. Grady y E.A. O'Rear, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 445 (1997) 153.
24. S.K. Bhattacharya, Ed., *Metal-Filled Polymers. Properties and Applications*, Marcel Dekker, Inc., New York (1986).
25. C. Pierre, R. Deltour, J.A.A.J. Perenboom y P.J.M. van Bentum, *Phys. Rev. B*, 42 (1990) 3380.
26. I. Balberg, *Phys. Rev. Lett.*, 59 (1987) 1305.
27. K.P. Dharmasena y H.N.G. Wadley, *J. Mater. Res.*, 17 (2002) 625-631.
28. J.C. Dyre, *Phys. Rev. B*, 48 (1993) 12511-12525.
29. J.E. Gubernatis y P.L. Taylor, *J. Phys. C*, 6 (1973) 1889.
30. A.B. Harris, *Phys. Rev. B*, 28 (1983) 2614-2629.
31. F. Brouers, *J. Phys. C*, 19 (1986) 7183-7193.
32. D. J. Bergman, *Physica A*, 157 (1989) 72-88.
33. M.V. Etin y G.M. Entin, *JETP Lett.*, 64 (1996) 467-472.
34. A.A. Snarskii, *Tech. Phys. Lett.*, 22 (1996) 705-706.
35. M. Barthelemy, *Physica B*, 279 (2000) 48-51.
36. A. Okazaki, K. Horibe, K. Maruyama y S. Miyazima, *Phys. Rev. E*, 61 (2000) 6215-6218.
37. S. Shinagawa, Y. Kumagai y K. Urabe, *Porous Mater.*, 6 (1999) 185-190.