

CÁLCULO DE LOS PARÁMETROS DE TRANSPORTE EN MATERIALES COMPUESTOS CON INCLUSIONES DE GRANOS MACROSCÓPICOS POLIMÉRICOS CONDUCTORES

Fernando Naranjo Mayorga¹, Jairo Giraldo Gallo² y Nicanor Poveda Tejada¹

¹*Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia*

²*Universidad Nacional de Colombia*

RESUMEN

Usamos un modelo basado en el formalismo de la aproximación de campo medio (MFA) para el cálculo de los parámetros involucrados en los fenómenos de transporte como las conductividades eléctrica y térmica y el coeficiente Seebeck en medios inhomogéneos de dos componentes, como una aplicación utilizamos el cobre como medio anfitrión e inclusiones granulares de un polímero conductor. Tenemos en cuenta los efectos debido a las propiedades microestructurales del material compuesto así como la forma y dimensión de los granos, la fracción de volumen ocupado por las inclusiones en el medio.

ABSTRACT

We use a model based on the formalism of the mean field approximation (MFA) for the calculation of the parameters involved in the phenomena of transport as the electrical and thermal conductivities and the Seebeck coefficient in unhomogeneous matter of two components, as an application we use the copper as a host matter and granular inclusions of a conductive polymer. We bear in mind the effects due to the microstructural properties of the composite material as well as the form and dimension of the grains, the fraction of volume occupied by the inclusions in the composites.

I. INTRODUCCIÓN

Los fenómenos termoeléctricos son el producto de la interrelación entre la densidad de corriente eléctrica y el flujo de calor en un sistema que esta en presencia de un gradiente de temperatura. Esto permite la posibilidad de utilizar materiales como dispositivos generadores de potencia termoeléctrica y en la termorefrigeración. Los parámetros que gobiernan los diferentes aspectos del funcionamiento de los dispositivos de conversión de energía termoeléctrica son la figura de mérito y el factor de potencia termoeléctrica. Se han desarrollado diferentes alternativas para incrementar estos dos parámetros, tales como la búsqueda de nuevos materiales, las aleaciones de materiales termoeléctricos conocidos y la explotación de los efectos cuánticos y de dimensión en sistemas de superredes o múltiples pozos cuánticos. Sin embargo, es posible mejorar las propiedades de transporte y además analizar las propiedades ópticas de medios compuestos granulados de dos o más componentes. Por conveniencia teórica y simplicidad matemática, la fase discontinua comúnmente se ha modelado con partículas esféricas. Sin embargo es posible encontrar inclusiones que se apartan de esta forma. Cuando las inhomogeneidades están en una escala lo suficientemente grande, pueden tratarse mediante la teoría clásica de transporte lineal. Recientemente se ha encontrado una técnica de aproximación de campo medio (MFA), basada en la teoría de Maxwell-Garnett (MGA) de desacoplamiento de campo, con la cual se ha predi-

cho que los factores de potencia termoeléctrica de un medio de dos componentes es mayor que el valor de las componentes puras. Con esta técnica también se puede estimar la respuesta dieléctrica efectiva ϵ_M , que para inclusiones anisotrópicas está representada por un tensor de segundo rango y que da cuenta de las propiedades ópticas de los materiales compuestos. Estas propiedades varían con la fracción de volumen de las inclusiones, sus propiedades estadísticas y la función dieléctrica de los constituyentes [1].

En este trabajo estimamos los parámetros que definen los fenómenos de transporte a partir de las densidades de corriente eléctrica y térmica. Luego se resume el análisis del cálculo de la conductividad eléctrica efectiva de medios compuestos con base en el modelo MGA. Se ejemplifica éste modelo en un compuesto cuyo material anfitrión es el cobre y se consideran inclusiones granulares de un polímero conductor dopado con Yodo. Por último, se hace el respectivo análisis de los parámetros, se presentan las conclusiones y las posibles perspectivas de trabajo en este campo.

II. APROXIMACIÓN DE MAXWELL-GARNETT (MGA)

La aproximación de Maxwell-Garnett (MGA), también conocida como aproximación de Clausius-Mossotti, es una teoría de campo medio. Actualmente, es uno de los métodos ampliamente usados para el cálculo de las propiedades de transporte de medios inhomogéneos [2,3]. La única propiedad estadística que se requiere para esta teoría es la fracción de volumen f ocupada por las inclusiones o granos. En el MGA se desprecia por completo las fluctuaciones de campo local causadas por el desorden espacial de los momentos dipolares y multipolares inducidos por otras inclusiones [4].

Consideremos un compuesto con inclusiones esféricas de conductividad σ_g inmersas en un medio anfitrión de conductividad σ_h . Supongamos que el sistema es excitado por un campo eléctrico externo y uniforme E_0 producido por densidades de carga y corriente, introducidas para perturbar el sistema, opuesto al campo inducido por la polarización o cargas de conducción.

Para el cálculo del campo eléctrico en el interior como en el exterior de los granos esféricos, se resuelve la ecuación de Laplace en coordenadas esféricas. Además, considerando las expresiones para los valores promedio de los campos aplicados, se puede calcular la conductividad eléctrica efectiva del medio compuesto:

$$\sigma_e = \sigma_h \frac{(1-f)[\sigma_g L_\zeta + (1-L_\zeta)\sigma_h] + f\sigma_g}{(1-f)[\sigma_g L_\zeta + (1-L_\zeta)\sigma_h] + f\sigma_h} \quad (1)$$

y el coeficiente Seebeck efectivo:

$$\alpha_e = \frac{\sigma_h [\gamma_g L_\zeta + (1-L_\zeta) \gamma_h]}{[(1-f) [\gamma_g L_\zeta + (1-L_\zeta) \gamma_h] + f \gamma_h] \sigma_e} + \left[(1-f) \alpha_h + f \frac{\sigma_g [(1-L_\zeta) \gamma_h \alpha_g + \gamma_g \alpha_h L_\zeta]}{[\sigma_g L_\zeta + (1-L_\zeta) \sigma_h] [\gamma_g L_\zeta + (1-L_\zeta) \gamma_h]} \right] - f \frac{(\sigma_h \alpha_h \gamma_g - \sigma_g \alpha_g \gamma_h) L_\zeta}{[\sigma_g L_\zeta + (1-L_\zeta) \sigma_h] [(1-f) \gamma_g L_\zeta + (1-L_\zeta) \gamma_h + f \gamma_h]} \quad (2)$$

Un resultado similar se puede obtener para la conductividad térmica y el coeficiente Seebeck efectivo [5].

III. APLICACIÓN EN UN MEDIO COMPUESTO

Utilizando la AMG, el interés es dilucidar el comportamiento del factor de potencia termoeléctrica efectiva $W_e = \sigma_e \alpha_e^2$ y la figura de mérito, como función de la fracción de volumen f para un medio compuesto en donde el material anfitrión es el cobre y las inclusiones son granos de polímeros conductores, Poliacetileno dopado con yodo. Se considera un medio compuesto en donde la forma de las inclusiones son placas paralelas. De la literatura [6] se han tomado los valores del material en bloque, medidos a temperatura ambiente, para cada una de las componentes.

Los parámetros termoeléctricos del material anfitrión son: $W_h = 1.9 \times 10^{-4} \text{ W/mK}^2$, $\Delta_h = 4.8 \times 10^{-7} \text{ 1/K}$, $\Delta_g = 10^{-4} \text{ 1/K}$, $\sigma_h = 5.8 \times 10^7 \text{ 1/}\Omega\text{m}$, $\sigma_g = 1.111 \times 10^6 \text{ 1/}\Omega\text{m}$, $\gamma_h = 404.65 \text{ V/}\Omega\text{m}$, $\gamma_g = 8.96 \text{ V/}\Omega\text{m}$, $\alpha_h = 1.83 \times 10^{-6} \text{ V/K}$, $\alpha_g = 28.4 \times 10^{-6} \text{ V/K}$.

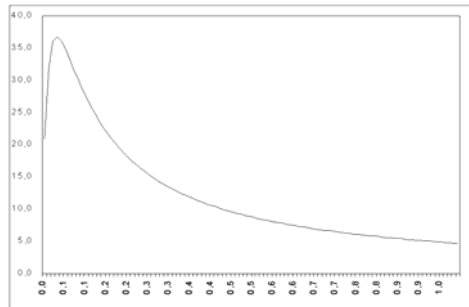


Figura 1. Factor de potencia termoeléctrico efectivo W_e / W_h

El máximo valor del factor de potencia efectivo se encuentra para una fracción de volumen del polímero en 0.1, para una microestructura de placas paralelas, la cual es la geometría que más favorece el incremento en el factor de potencia termoeléctrica [3].

IV. CONCLUSIONES

El valor máximo del factor de potencia se logra para bajas concentraciones de la componente termoeléctrica en la mezcla. No se consideran los efectos de la estructura electrónica de cada una de las componentes sobre el medio heterogéneo, al igual que los posibles procesos de dispersión electrónica y fonónica que pueden modificar drásticamente las propiedades de transporte efectivo del medio compuesto.

Se observa que el incremento del factor de potencia se da para inclusiones de polímeros conductores con conductividades más bajas que las del anfitrión.

Valdría la pena extender al caso termoeléctrico la llamada teoría de polarizabilidad renormalizada [2] para estudiar la respuesta dieléctrica efectiva de medios compuestos formados por inclusiones esféricas alineadas.

Es indispensable desarrollar modelos que permitan incorporar a escala microscópica efectos como la recombinación superficial y efectos de interfase, relacionados con los procesos de fotones y portadores de carga en la frontera granular, para un adecuado cálculo de los coeficientes cinéticos de transporte de cada una de las componentes puras que forman el medio compuesto.

REFERENCIAS

- [1] L.I. Anatyck. Physics of Thermoelectricity. Institute of Thermoelectricity, Academy of Sciences and Ministry of Education of Ukraine, 1998.
- [2] R. G. Barrera, J. Giraldo, and W.L. Mochán. Effective dielectric response of a composite with aligned spheroidal inclusions. *Phys. Rev. B*, 47:8528, 1993.
- [3] O. M. Medina. Propiedades Termoeléctricas de medios compuestos. Tesis de Maestría. Universidad Nacional de Colombia. 2003.
- [4] G. Monsiavais, R.G. Barrera, and W. L. Mochán. Renormalized Polarizability in the Maxwell-Garnett theory. *Phys. Rev B*, 38:5371, 1988.
- [5] D.J.Bergman and L.G. Fel. Enhancement of thermoelectric power factor in composite thermoelectrics. *J. appl. Phys.*, 85:8205, 1999.
- [6] A. Shakouri y L. Suquan. Thermoelectric Power Factor for Electrically Conductive Polymers. Proceedings of International Conference on Thermoelectrics, Baltimore, Sep. 1999.