



Title: Estudio de la conductividad eléctrica en nano compuestos eléctricos con nano tubos desordenados

Author: Gustavo, MEDINA-ÁNGEL, Gennadiy, BURLAK

Editorial label ECORFAN: 607-8534
BCIERMMI Control Number: 2018-03
BCIERMMI Classification (2018): 251018-0301

Pages: 13
Mail: *gustavo.isc@hotmail.com*
RNA: 03-2010-032610115700-14

ECORFAN-México, S.C.
244 – 2 Itzopan Street
La Florida, Ecatepec Municipality
Mexico State, 55120 Zipcode
Phone: +52 1 55 6159 2296
Skype: ecorfan-mexico.s.c.
E-mail: contacto@ecorfan.org
Facebook: ECORFAN-México S. C.
Twitter: @EcorfanC

www.ecorfan.org

Holdings

Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic Republic
Spain	El Salvador	of Congo
Ecuador	Taiwan	Nicaragua
Peru	Paraguay	

1.-Introducción

En la actualidad la industria de la ingeniería a apostado por la nanotecnología, aprovechando su tamaño para poder construir dispositivos más pequeños y resistentes, esto trae como consecuencia la creación de materiales conductores que puedan transmitir la información corrientes eléctricas por medio de nano estructuras conductoras. Este artículo se enfoca al estudio de la conductividad a través de estas nano estructuras [1].

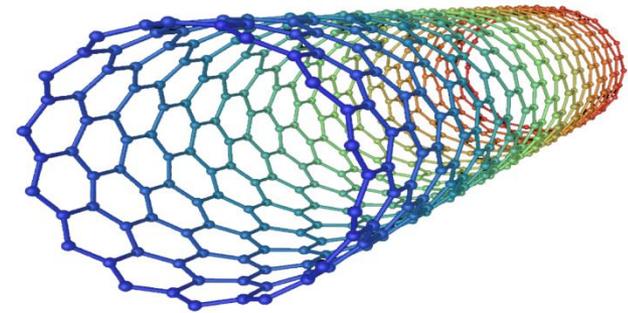


Figura 1 Forma de un nanotubo a base de grafeno.

Este estudio es analógico y aplicado en la percolación de los CNT(Nanotubos de carbono), debido a sus extraordinarias y variadas aplicaciones en la rama de la nano-ingeniería como son por ejemplo en la creación de sensores pizoeléctricos, membranas artificiales[2], pinturas conductoras, textiles inteligentes, entre otras aplicaciones.

Nosotros estudiamos la percolación de los nanotubos de carbono en un sistema 3D, en donde implementamos cilindros que semejan la forma de los nanotubos de manera desordenada, con radios y longitudes de diferentes dimensiones.

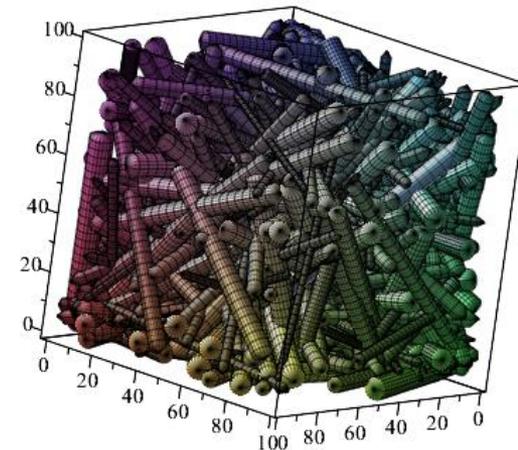


Figura 2 Rejilla tridimensional de percolación con nanotubos desordenados.

[1] Rahman, R., & Servati, P. (2012). Effects of inter-tube distance and alignment on tunnelling resistance and strain sensitivity of nanotube/polymer composite films. *Nanotechnology*, 5(055703), 23.

[2] Kuo-Chi Lin., Daniel Lee., Linan An., Young Hoon Joo. (2013). Finite-Size Scaling Features of Electric Conductivity Percolation in Nanocomposites. *Nanoscience and Nanoengineering*, 1(1), 15-22.

Objetivos

- **2.-Objetivo General.**

El objetivo general de esta investigación es encontrar una probabilidad crítica que satisfaga la percolación en la conductividad eléctrica, ya que esta probabilidad ayudaría a minimizar el ahorro en los materiales.

- **3.-Objetivos Específicos.**

- Simular un sistema que represente los nanotubos de manera computacional.
- Encontrar el clúster infinito la y probabilidad crítica.
- Generar resultados para varias pruebas variando la longitud del cilindro.

4.-Objeto Cilindro (Nanotubo)

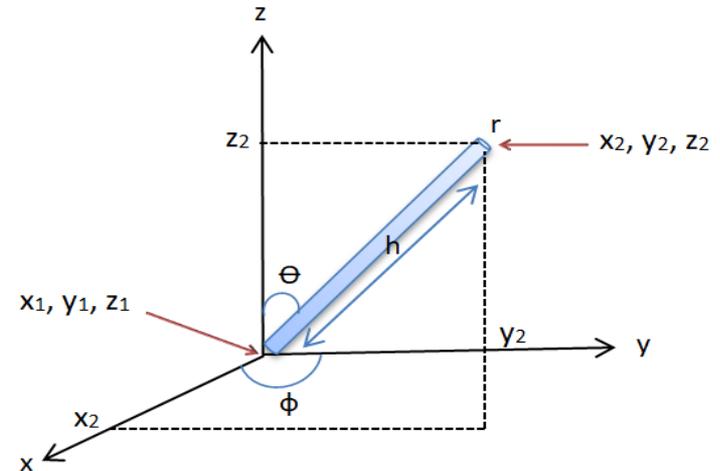


Figura 3 Esquema del nanotubo con sus parámetros y variables correspondientes.

Para obtener los valores x_2 , y_2 y z_2 , es necesario aplicar las ecuaciones 1, 2 y 3, ya que estos valores son determinados a partir de los puntos iniciales (x_1 , y_1 y z_1), ángulos de orientación (θ y φ) y longitud h del nanotubo [3].

- $z_2 = z_1 + h \cdot \cos(\theta)$ (1)
- $y_2 = y_1 + h \cdot \sin(\theta) \cdot \sin(\varphi)$ (2)
- $x_2 = x_1 + h \cdot \sin(\theta) \cdot \cos(\varphi)$ (3)

5.-Percolacion y clústeres

Un clúster se genera cuando existe contacto entre dos o más nanotubos dentro de la rejilla [8], mientras que la percolación es el fenómeno que se da cuando la agrupación de estos nanotubos forma un clúster suficientemente grande que es capaz de atravesar la rejilla desde un punto hasta el otro extremo de la rejilla, a este clúster atraviesa la rejilla de un extremo a otro es llamado clúster infinito.

En la figura 4, Se muestra una agrupación de cilindros formando un clúster, mientras que en la figura 5, podemos observar un sistema conformado por cilindros agrupados formando un clúster infinito, donde a través de ella será conducida la corriente eléctrica.

Los cilindros y clústeres que no forman parte de este clúster fueron eliminados para poder visualizar solo el clúster predominante, del cual podemos observar como algunos cilindros tocan el otro extremo de la rejilla [4].

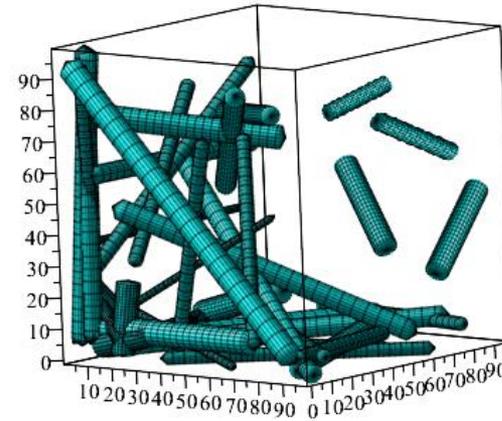


Figura 4 Clúster formado por cilindros con $P=0.01$

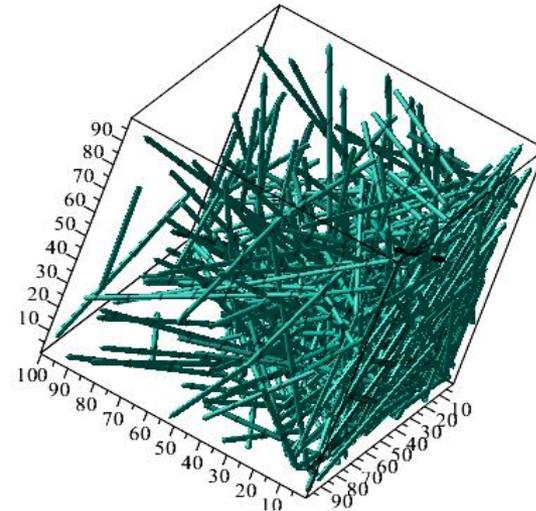


Figura 5 Clúster infinito con $P=0.2$

6.-Distribución Gauss.

Aplicamos la distribución Gauss para nuestro estudio, ya que nos permite generar objetos con cierta desviación de error [5]. Nosotros aplicamos esta desviación al parámetro del radio r denominado como μr y al parámetro longitud h , denominado como μh y las desviaciones para estos parámetros son denominadas como σr y σh , respectivamente, estas últimas serán las desviaciones de error que se les aplicara a cada uno de los objetos cilindro, al crearlas en el sistema.

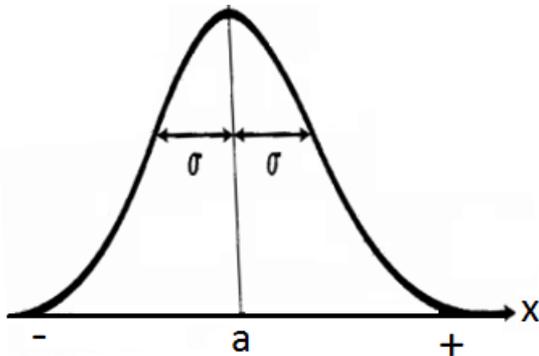


Grafico 1 Distribución Gauss

Dónde: $a = (h, r)$ y σ es aplicable para “a”.

[5] Hongqing ZHENG, Yongquan ZHOU. ((2012). A Novel Cuckoo Search Optimization Algorithm Base on Gauss Distribution. Journal of Computational Information Systems, 8(10), 4193–4200.

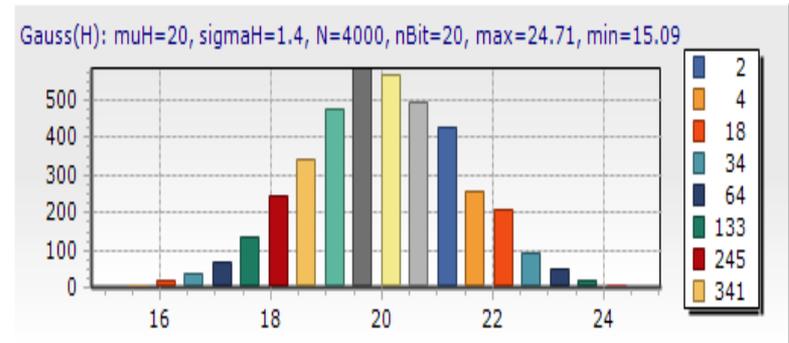


Grafico 2 Histograma de la distribución de Gauss de la longitud h de los nanotubos.

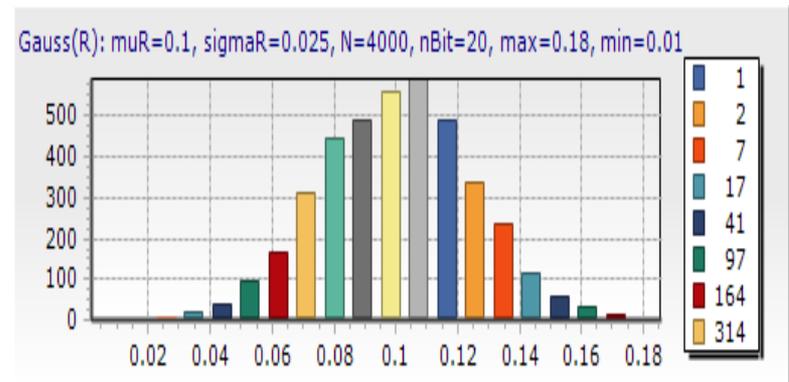


Grafico 3 Histograma de la distribución de Gauss del grosor r de los nanotubos.

7.-Estructura de programación.

Para la programación y generación de los resultados utilizamos como lenguaje de programación, Microsoft Visual C#, en su versión 2017. Se crearon 4 clases principales; la primera clase **Cilindro**, donde se construye el objeto cilindro que simulara cada uno de los CNT, la segunda clase **ArrayCilindros**, la cual contiene varios objetos en la rejilla, en esta clase se define si existe o no percolación para una determinada probabilidad P y también se obtiene el volumen de clúster infinito sobre total de los cilindros en el sistema $P(p)$. La tercera clase, **ParallCilindros** se encarga de realizar varias calculaciones para una distribución de P en paralelo usando la librería TPL (Task Parall Label) de C# [6], ya que para cada probabilidad puede existir o no clústeres infinitos, es por ello que se necesitan calcular varias pruebas variando P , en donde se tienen que definir una probabilidad inicial, una probabilidad final y el numero pruebas que se quieren distribuir en la probabilidad, de esta manera se distribuyen N probabilidades en un rango de probabilidad a estudiar.

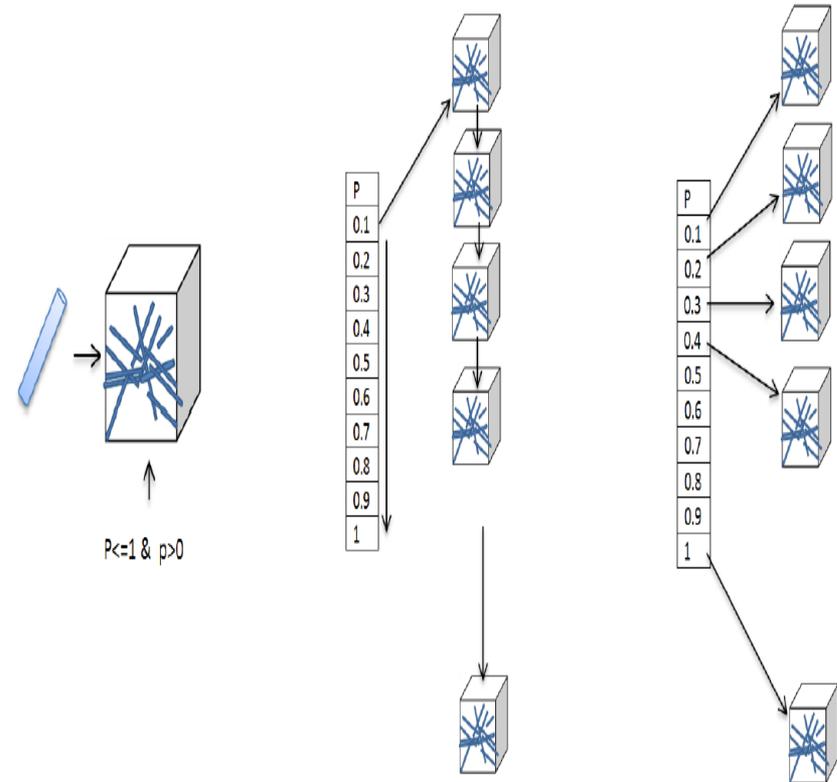


Figura5 Esquema de programación

8.-Resultados de calculación

N	Probabilidad	P(p)
1	0.01	0.00422535211267606
2	0.0311111111	0.0726643598615917
3	0.0522222222	0.334449884050502
4	0.0733333333	0.686885549990725
5	0.0944444444	0.844773960216998
6	0.1155555556	0.952211338676165
7	0.1366666667	1.00441944556047
8	0.1577777778	1.00013037809648
9	0.1788888889	1.00600046157397
10	0.2	1.01206854936037

Tabla 1 Se muestran los resultados hechos para un rango de probabilidad de 0.01 hasta 0.2 con 10 probabilidades distribuidas en el rango.

De la tabla 1, podemos observar que existe percolación a partir del valor de probabilidad de 0.052222222, que se encuentra sombreada de azul en la tabla, para los valores posteriores a este, existen clústeres infinitos. Los valores utilizados para las dimensiones del cilindro fueron: longitud del cilindro: $\mu h=20 \text{ nm}$, grosor del cilindro: $\mu r=0.1 \text{ nm}$, y con desviaciones de $\sigma h=1.4$ en su longitud y $\sigma r=0.025$ en su grosor, donde nm es la unidad básica para 1 nanómetro [7].

[7] Zhao, X. B., Ji, X. H., Zhang, Y. H., Zhu, T. J., Tu, J. P., & Zhang, X. B. (2005). Bismuth telluride nanotubes and the effects on the thermoelectric properties of nanotube-containing nanocomposites. *Applied Physics Letters*, 86(6), 062111.

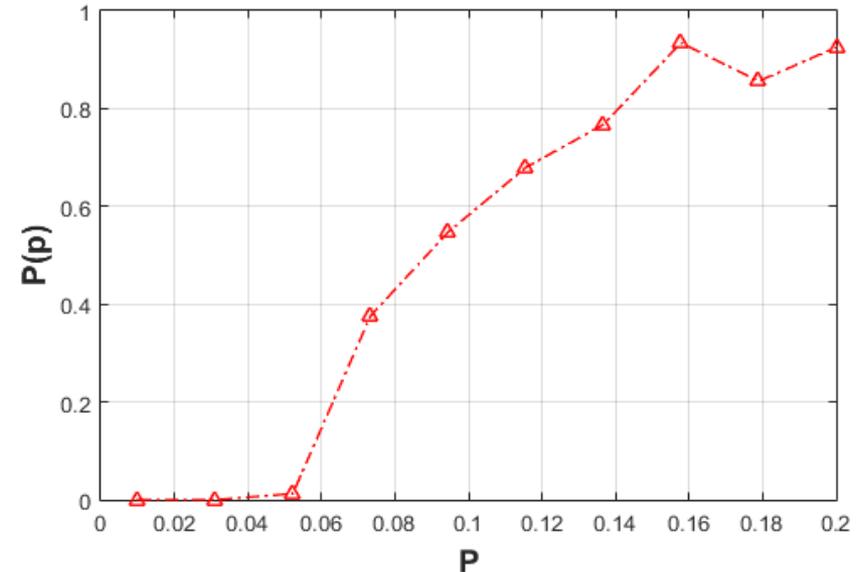


Gráfico 4 Se muestra el comportamiento de $P(p)$ para 10 calculaciones, entre las probabilidades: 0.01 hasta 0.2.

Las pruebas realizadas para cada calculación en paralelo fueron aproximadamente de 45 minutos a 1 hora en una computadora Dell Intel (R) Core (TM) i7-6700HQ de 64 bits, a 2.60 GHZ con 8 GB de RAM de almacenamiento.

9.-Ajuste de los datos

A partir de los datos de la tabla 1, podríamos tener una idea de que valor para P que es necesario para poder obtener clústeres infinitos, y conseguir metales conductores, más sin embargo, en el rango de calculación entre cada probabilidad existen muchos valores que no se analizaron, ya que P puede ser demasiado finito como cualquier número.

Es por ello que se realizó un ajuste numérico de los datos [8], utilizando la función **Fit** en Matlab a los resultados anteriores determinados por la ecuación:

$$P(p) = b(p - pc)\beta \quad (9)$$

Dónde: b , pc y β , son constantes.

En la gráfica 2 podemos apreciar la aplicación de la función **Fit** a los valores de la gráfica 1.

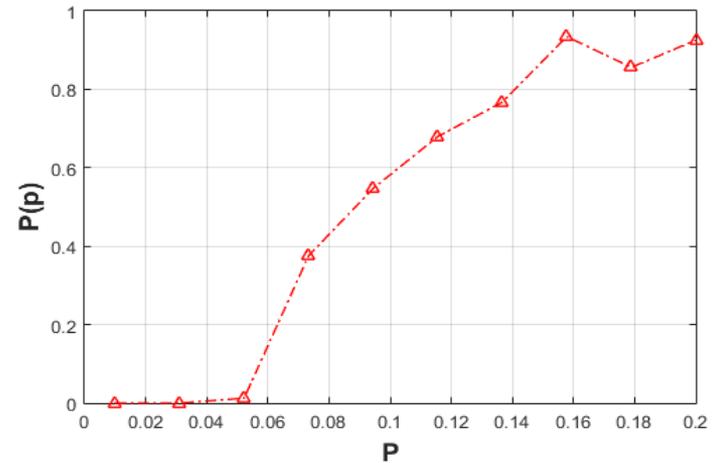


Gráfico 4 Se muestra el comportamiento de $P(p)$ para 10 calculaciones, entre las probabilidades: 0.01 hasta 0.2.

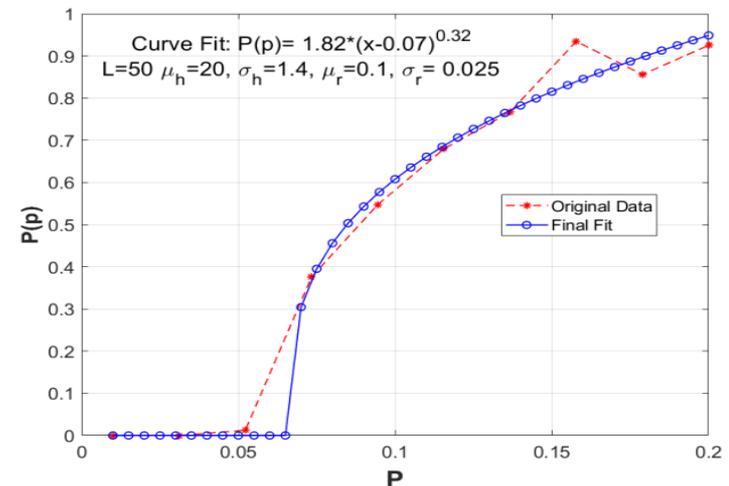


Gráfico 5 Datos ajustados de la gráfica 1, en un rango de probabilidad $P=0.1$ a 0.2 , con valores de: $L=50$, $\mu_h=20$, $\sigma_h=1.4$, $\mu_r=0.1$ y $\sigma_r=0.025$.

9.1.-Agrupación de curvas P(p)

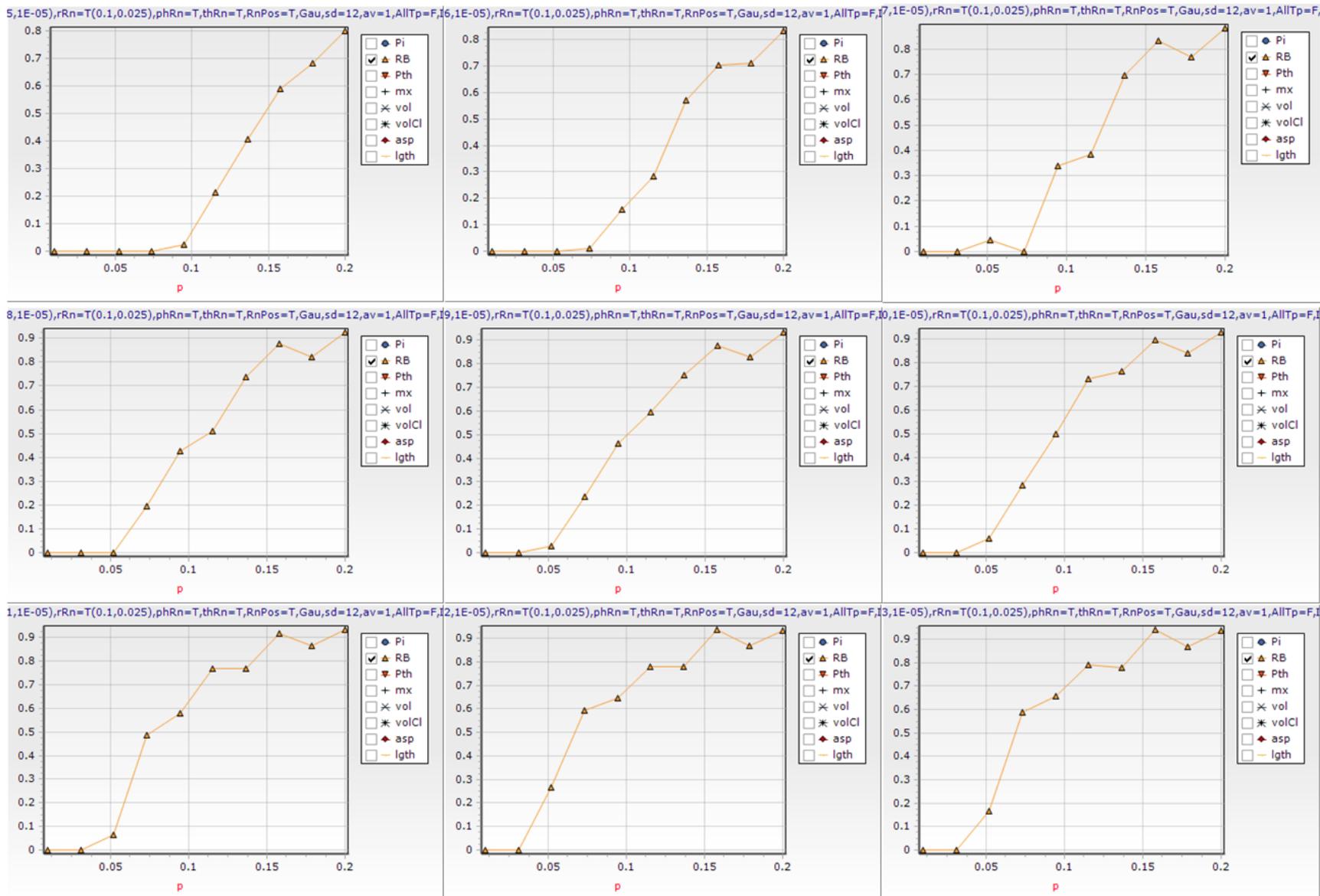


Grafico 6 Agrupación de curvas $P(p)$, con diferentes longitudes de cilindro (μh)

9.2.-Agrupación de curvas P(p) y curvas Fit

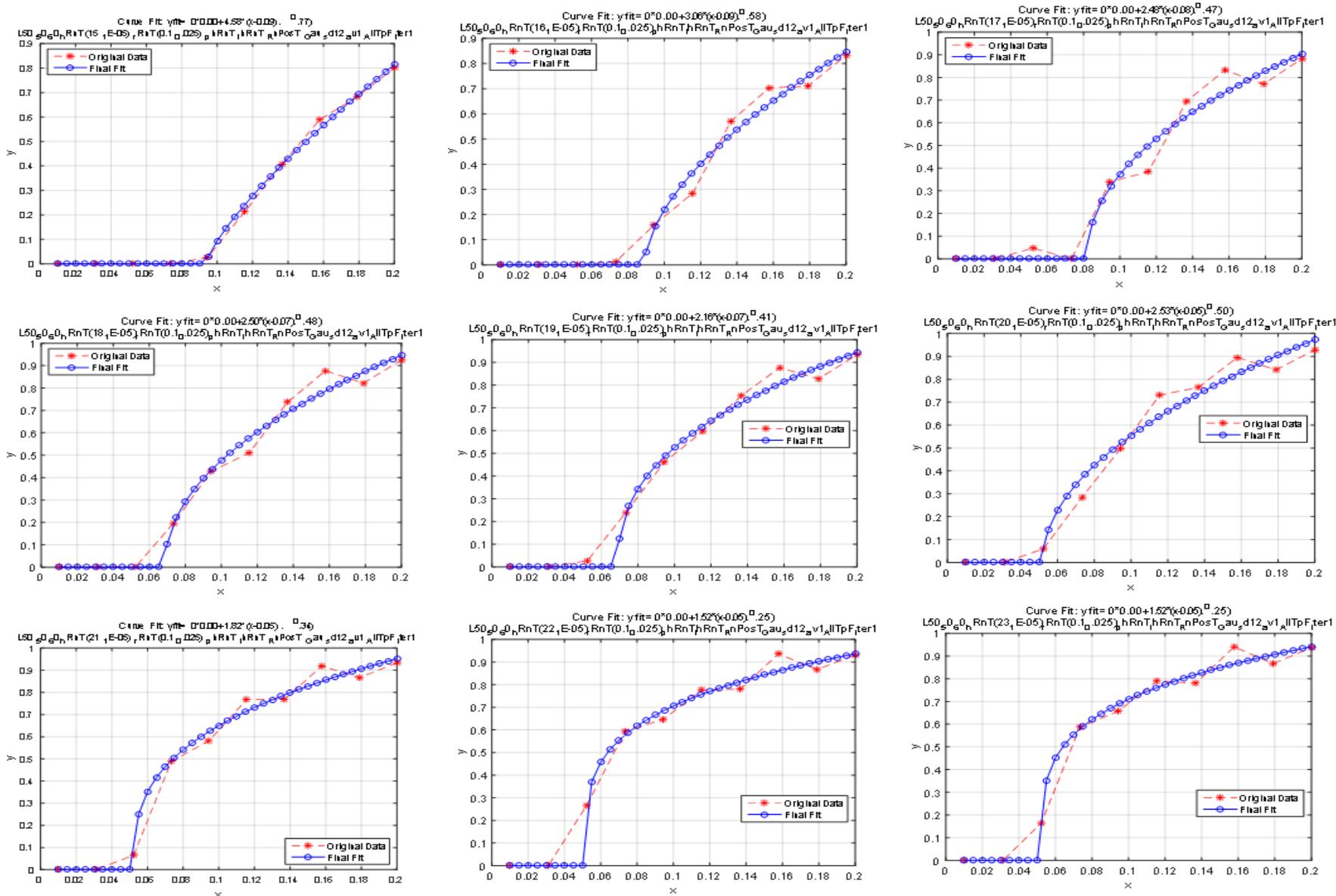


Gráfico 7 Agrupación de curvas P(p) con curvas Fit, con diferentes longitudes de cilindro (μh)

9.3.-Tabla de resultados de curvas Fit

Realizamos una serie de pruebas variando el valor de la longitud del nanotubo simulado de 15 a 25 nanómetros (rangos típicamente usados en la generación de nanotubos en la ingeniería) en una rejilla con dimensiones $L=50 \times 50 \times 50$, conservando los mismos valores para el grosor del nanotubo $\mu r=0.1$ y su desviación $\sigma r=0.025$, mientras que el valor para la desviación de su longitud es $\sigma h=1.4$. En la tabla 2, podemos observar que para cada valor de μr , obtenemos un valor de probabilidad crítica P_{cr} , que disminuye conforme aumentamos la longitud del nanotubo, esto es lógico, pues mientras más largo y grueso sea el nanotubo, hay más posibilidad de generar intercepción entre los nanotubos y por lo tanto clústeres infinitos, recordemos que la probabilidad crítica, entre más pequeña sea, será más el ahorro que podemos tener en cuanto a materiales, es por ello que es bastante importante encontrar una probabilidad crítica satisfactoria para μh y μr , para este artículo nosotros enfocamos este estudio hacia la longitud del cilindro μh y para algunas desviaciones de sus desviaciones σr .

Mh	L	σh	μr	σr	P_{cr}
15	50	1.4	0.1	0.025	0.084
16	50	1.4	0.1	0.025	0.09
17	50	1.4	0.1	0.025	0.091
18	50	1.4	0.1	0.025	0.072
19	50	1.4	0.1	0.025	0.073
20	50	1.4	0.1	0.025	0.066
21	50	1.4	0.1	0.025	0.052
22	50	1.4	0.1	0.025	0.052
23	50	1.4	0.1	0.025	0.052
24	50	1.4	0.1	0.025	0.052
25	50	1.4	0.1	0.025	0.052

Tabla 2 Se muestran diferentes variaciones de longitudes del cilindro ($\mu h=15$ nanómetros hasta $\mu h=25$ nanómetros), que pueden simular en nuestro sistema.

9.4.- Grafico de las P_{cr} obtenidos de los gráficos Fit.

En el grafico 8, se muestra el comportamiento de la tabla 2 aplicando en donde podemos observar una P_{cr} , que disminuye con nanotubos con longitudes mas largos. Podemos observar también que para longitudes cercanas a 25 nanómetros, se alcanza una P_{cr} más estable.

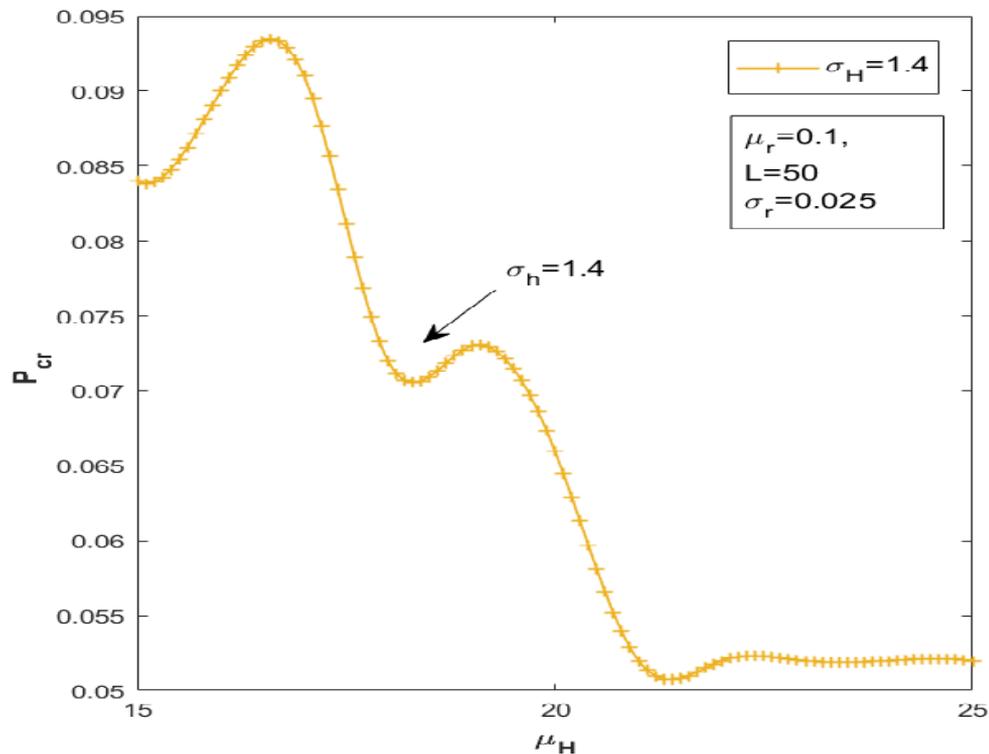


Grafico 8 Se muestra el comportamiento de P_{cr} , para varias pruebas en donde se varia la longitud del cilindro μ_h de 15 a 25 nanómetros, para una desviación $\sigma_h = 1.4$

9.5.- Resultados para varias variaciones de desviaciones de σ_h , longitudes del nanotubo

Realizamos algunas pruebas variando las desviaciones para el rango de μh de 15 a 25 nanómetros y con otras desviaciones de: 0.01, 0.05, 0.4, 1, 1.2 y 1.4 nanómetros, en el grafico 9 podemos observar el comportamiento de estas desviaciones para rangos $\mu h=15$ a 25 nanómetros.

Podemos apreciar que para los valores de 0.001, 0.05, 0.4 los valores convergen aproximadamente en un rango de probabilidad crítica P_{cr} de 0.09 a 0.1 cuando los nanotubos miden 15 nanómetros a diferencia de las desviaciones mayores a 1, donde los valores de P_{cr} caen por debajo de 0.09 o por encima de 0.1.

A partir del valor $\mu h = 22$ y valores mayores a este podemos observar que la probabilidad crítica se estabiliza sin importar la desviación que se les aplique.

También observamos que las fluctuaciones en las curvas son muy similares en picos para los puntos en el eje $X \rightarrow \mu h$.

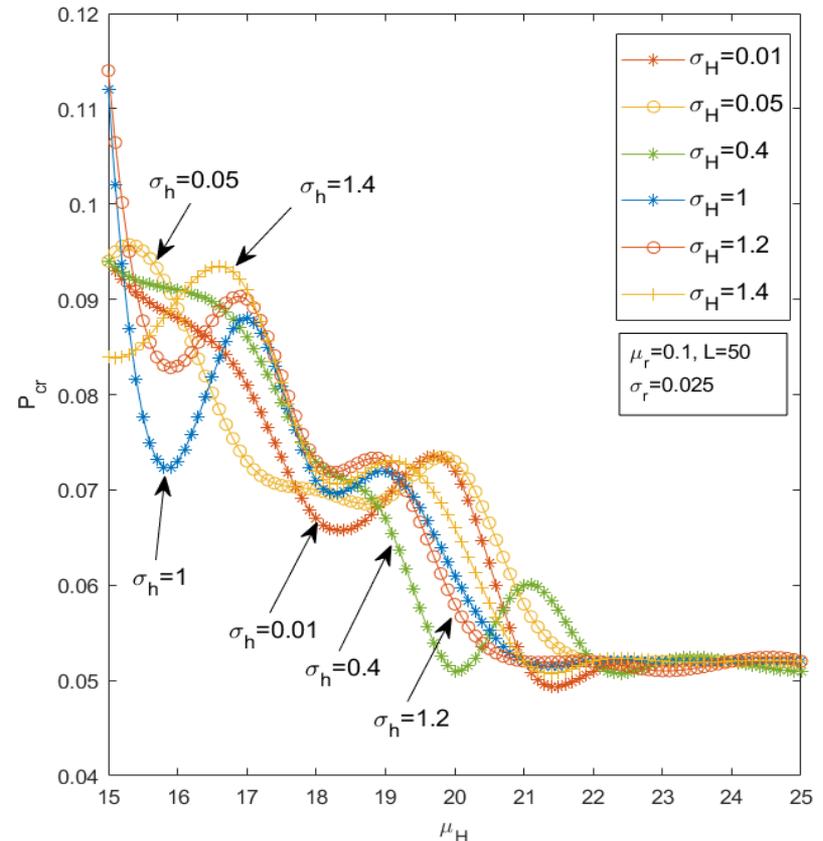


Grafico 9 Se muestran los resultados graficados para los rangos de $\mu h = 12$ a 25 nanómetros pero con 6 desviaciones diferentes: $\sigma_h = 0.01, 0.05, 0.4, 1, 1.2$ y 1.4 , con grosores de radio $\mu r = 0.1$ y $\sigma_h = 0.25$ en una rejilla de dimensión $L=50$ para las 6 curvas.

Conclusiones

- A partir de los resultados obtenidos del ultimo grafico podemos decir que existe cierta tendencia para alcanzar una probabilidad critica pequeña cuando los nanotubos son largos, aproximadamente mayores o iguales a $\mu h = 22$ nanómetros y que las desviaciones no influyen cuando los nanotubos tienen este valor, pero si influyen cuando son menores a este.
- El P_{cr} más estable para todas las desviaciones en nuestras pruebas es aproximadamente de 0.05 para nanotubos mayores o iguales a 22 nanómetros y como consecuencia en este rango no habrá fallas en la conductividad eléctrica “S”, ya que el número de nanotubos y su volumen es bastante grande como para poder formar clústeres infinitos que conduzcan la electricidad de un punto a otro del medio.
- Como trabajo a futuro se pretende implementar de manera conjunta las desviaciones en el grosor “ σr ” y de longitud “ σh ” del nanotubo, y de esta manera obtener más variaciones para nuestro caso de estudio.



ECORFAN®

© ECORFAN-Mexico, S.C.

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162,163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169,209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BCIERMMI is part of the media of ECORFAN-Mexico, S.C., E: 94-443.F: 008- (www.ecorfan.org/ booklets)