

## Conductividad térmica macroscópica de sistemas nanoestructurados en configuraciones metal-dieléctrico

Rodríguez, Luis Antonio<sup>1</sup>; Martínez Ricci, María Luz<sup>2</sup>; Ortiz, Guillermo Pablo<sup>1</sup>; Mochán Backal, W. Luis<sup>3</sup>

<sup>1</sup> GREMAP. Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Avenida Libertad 5470, W3404AAS, Corrientes, Argentina.

<sup>2</sup> Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE), CONICET, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pab. II, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina.

<sup>3</sup> Instituto de Ciencias Físicas. Universidad Nacional Autónoma de México. Avenida Universidad s/n, Cuernavaca, Morelos 62210, México.

educ.fisica.luis@gmail.com

Área temática: C. Propiedades de nanomateriales

Para lograr un control térmico preciso en terapias fototérmicas, liberación de fármacos activada por luz y gestión del calor a nanoescala, es de interés el diseño de sistemas compuestos nanoestructurados con morfologías y concentraciones arbitrarias, así como su caracterización mediante la conductividad térmica efectiva.

La analogía entre el transporte térmico estacionario y la electrostática de medios materiales ha permitido establecer modelos analíticos de la conductividad térmica macroscópica ( $\kappa^M$ ) [1], promediando las conductividades térmicas microscópicas de compuestos con geometrías sencillas y diluidas. Para geometrías complicadas y concentraciones altas, las fluctuaciones del campo local generan variaciones en  $\kappa^M$  que deben considerarse. Proponemos un modelo de homogenización en el que consideramos que los campos asociados al problema térmico  $\tilde{q}$  y  $\nabla T(\vec{r})$ , se descomponen en sub-espacios longitudinales ( $LL$ ) y transversales ( $TT$ ), tanto como en promedios ( $pp$ ) y fluctuantes ( $ff$ ). Aplicando en estas representaciones el teorema de inversión de matriz por bloques, se obtiene  $(\kappa_{LL}^M)^{-1} = (\kappa_{LL})_{pp}^{-1}$ , donde  $(\kappa_{LL})_{pp}^{-1}$  representa el promedio del inverso de la componente longitudinal de la conductividad térmica microscópica. Empleamos el paquete de uso libre *Photonic* [2] (perl-PDL) para obtener, mediante recursión de Haydock, una representación tridiagonal  $\kappa(\vec{r})$  y calcular eficientemente  $\kappa_{LL}^M$  mediante una fracción continuada con los elementos del tensor  $\kappa(\vec{r})$ .

En este trabajo se validan los resultados con modelos analíticos para sistemas de dos fases [1] y múltiples fases [3]. Para dos fases se estudian arreglos tridimensionales de nanopartículas esféricas metálicas de Au y Ag inmersas en distintos medios (aire, agua, sílica). Para múltiples fases se estudian arreglos periódicos de nanopartículas esféricas *core-shell* y su equivalente 2D (cilindros infinitos), inmersos en otro medio. La homogenización aquí propuesta es consistente con los modelos analíticos en los casos diluidos y para  $f \gtrsim 0.3$  (fracción volumétrica de la fase dispersa) presenta desviaciones, validadas por el teorema de Keller [4] para los casos bidimensionales.

Extendido a múltiples fases, el método propuesto permite abordar también la resistencia térmica interfacial  $R_K$ , asociada al salto de temperatura en la interfaz por mal contacto térmico entre las fases. Al reemplazar la interfaz por una delgada región de transición, donde la temperatura varía continuamente, se obtiene  $\kappa^M$  consistente con el modelo de Hasselman-Johnson [1], superando su límite de casos diluidos.

### REFERENCIAS

1. Pietrak, K.; Wiśniewski, T. S. *Journal of Power Technologies* 95 (2015) 14–24
2. Mochán, W. L.; Ortiz, G. P.; Mendoza, B. S. *Opt. Express* 18 (2010) 22119–22127
3. Mochán, W. Luis et al. *Phys. Status Solidi B* 2020 B (2020) 1900560
4. Ortiz, G.P. ; Mochán, W. Luis. *New Journal of Physics* 20 (2018) 023028