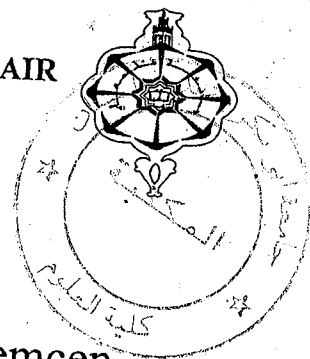


REPUBLICQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



THESE DE DOCTORAT D'ETAT

Présentée à l'université Abou-Bakr Belkaid de Tlemcen
Faculté des sciences
Département de Physique
Pour obtenir

**LE GRADE DE DOCTEUR D'ETAT EN
PHYSIQUE**

PRESENTEE PAR
Mme : AMRANI ZOUBIDA née DAOUDI
Sur le thème

**PROPRIETES ELECTRIQUES ET PHENOMENES DE
TRANSPORT DANS LES MILIEUX HETEROGENES**

DEVANT LE JURY :

Président:	Pr : N.E. CHABANE-SARI	Université de Tlemcen
Directeur de thèse :	Pr : B. BENYOUCEF	Université de Tlemcen
Examineurs :	Pr : T. BENOUAZ	Université de Tlemcen
	Pr : M. BOUAMOUD	Université de Tlemcen
	Pr : A. SAIDANE	ENSET d'Oran
	Pr : A. BELAIDI	ENSET d'Oran



Inscrit Sous le N°:
Date le: 08. FEV. 2008
Code: 2868

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire de physique théorique de l'université d'Oran, et poursuivi au laboratoire d'étude et prédiction de matériaux (LEPM).

J'adresse mes sincères remerciements à mon directeur de thèse, Monsieur le professeur B.BENYOUCEF, directeur de l'unité de recherche matériaux et énergies renouvelables, pour son aide dans la préparation de ce travail, je lui suis très reconnaissante de tous les précieux conseils, son soutien, ses encouragements, sa disponibilité et sa grande qualité humaine.

Je tiens tout particulièrement à exprimer tout ma reconnaissance à madame le professeur A.ALADJADJIAN doyen de la faculté des sciences de l'université de PLOVDIV, pour sa compétence, son aide la réalisation de ce travail.

Mes vifs remerciements vont à Monsieur le professeur N.E. CHAABANE.SARI pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider mon jury de thèse.

Je tiens à remercier chaleureusement Monsieur A.SAIDANE professeur à l'ENST d'ORAN et Monsieur A.BELAIDI professeur à l'ENSET d'ORAN, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'examiner mon travail.

Je remercie Monsieur T.BENOUAÏZ professeur à l'université de Tlemcen pour

RESUME

Le problème du calcul de la constante diélectrique effective ϵ_e d'un milieu inhomogène formé de plusieurs phases ayant chacune une constante diélectrique ϵ_i est discuté dans notre travail d'une manière mathématique ceci en introduisant une fonction caractéristique géométrique qui exprime la dépendance de ϵ_e des autres constantes diélectriques ϵ_i . La fonction caractéristique géométrique est un outil mathématique très efficace, l'étude analytique de cette fonction a été trouvée à partir de l'analyse de ses propriétés mathématiques ; dans le cas d'un milieu à deux phases.

Les variations linéaires de cette fonction nous ont permis de préciser le domaines de variation de la constante diélectrique effective. Nous avons présenté nos arguments en termes de constante diélectrique, mais tous les résultats trouvés sont aussi applicables au cas de la perméabilité magnétique, conductivité électrique etc.... La théorie de percolation, théorie des phénomènes stochastiques, basée essentiellement sur les concepts mathématiques tels que les calculs statistiques et l'évaluation des configurations géométriques, cette théorie permet de traduire le comportement des propriétés du système considéré lors de son passage d'une phase à l'autre, et plus particulièrement leurs comportement arrivés à un certain stade de transformation appeler seuil de percolation.

L'approximation du milieu effectif (A M E) à une seule liaison est une méthode analytique efficace qui nous permet d'aboutir à une valeur exacte de la conductance électrique effective en fonction des fractions de volume et des conductances de chaque phase. L'étude de la conduction dans les mélanges ayant une phase non conductrice par approximation milieu effectif (A M E), nous permet de prévoir une bonne description des phénomènes de transport se déroulant à l'interface de deux milieux.

Abstract

The problem of the calculation of the efficient dielectric constant ϵ_e of an (inhomogeneous) middle formed of several phases having each a dielectric constant ϵ_i debated in our work in a mathematical manner this while introducing a geometric characteristic function that expresses the dependence of ϵ_e of other dielectric constants ϵ_i

The theory of percolation, theory of stochastic phenomena based essentially on the mathematical concepts as the statistical calculations and the assessment of the geometric configurations, this theory permits to translate the behaviour of the properties of the considered system at the time of its passage from a phase to the other and more particularly their behaviour arrived to a certain stage of transformation called doorstep of percolation.

The approximation of the efficient milieu (AEM) to only one link is (a method) an efficient analytic method that allows us to succeed to an exact value of the effective electric conductance according to the fractions of the volume and the conductance of every phase.

The study of the conduction in the mixtures having q non driver phase by approximation efficient milieu (AME) allows us to foresee a good description of the

المخلص

مشكلة حساب كفاءة نمازل المستمر E_{∞} من (متغاير) مبدل شكلته من عدة مراحل وبعد كل الفه نمازل المستمر.. هاء. نوقشت في عملنا بطريقة رياضية في حين أن إدخال هذه الخاصية المصمة هندسي أن تعرج عن ارتصان.. نمازل غيرها... من الثوابت... هاء... نظرية النفاذ خلال المسامات ، نظرية الظواهر العشوائية التي تقوم أساسا على مفاهيم رياضية كما الإحصائية حساباته وتقييمه الهندسي التشكيلات .

وهذه النظرية على تصاريح لترجمة السلوك من خواص من النظام يعتبر في ذلك الوقت انه من المرور من مرحلة إلى أخرى وعلى الأخص سلوكهم وصلت إلى مرحلة معينة من دما إلى عتبة التحول من النفاذ خلال المسامات. التقريب من كفاءة بيئة (aem) إلى وصلة واحدة فقط هي (طريقة) كفاءة تحليليه للطريقة التي تسمح لنا بأن نتجج إلى المنضبطة قيمة الفعال مواصلة الصربانية وفقا لكسور في حجم و المواصلة من كل مرحلة.

الدراسة من التوصيل في المخالط بعد فاء غير سائق مرحلة به تقريبي كفاءة بيئة (أمي) يتبع لنا أن نتنبأ وصفا جيدا لنقل الظاهرة التي تحدث داخل نظم تقديم عتبات النفاذ خلال المسامات ، وهذا في حين ملازمة على البيئة في مسألة أ شبكة مكعب. إن النصح الذي يبدو حاليا أكثر المستخدمة في المسح من التوصيل إليه هو أن يقذف به في كل موقع من الذي نجعلنا إلى القانون من حبيبي المعادن.

SOMMAIRE

SOMMAIRE

INTRODUCTION

Chapitre I – PROPRIETES D'UN SEUL MILIEU HOMOGENE SOUS
L'INFLUENCE D'UN CHAMP ELECTRIQUE

I - Introduction

II - Le constant diélectrique

III - Le vecteur polarisation \vec{P}

IV - Polarisation des diélectriques

V- Les trois vecteurs électriques

VI - Cas où la polarisation \vec{P} n'est pas uniforme :

VII - Les équations électrostatiques en présence de diélectrique :

VIII – Conclusion

Chapitre II - INTRODUCTION DE LA FONCTION CARACTERISTIQUE
GEOMETRIQUE POUR EXPRIMER LA DEPENDANCE DE
LA CONSTANTE DIELECTRIQUE EFFECTIVE EN
FONCTION DES CONSTANTES DIELECTRIQUES DU
MILIEU

I – Introduction

II- La fonction caractéristique géométrique

II.1- Introduction du milieu effectif en utilisant le champ électrique

II.2 – Introduction du milieu effectif en utilisant le vecteur déplacement

II.3 - Méthode du calcul de ϵ_e en utilisant le champ électrique $\vec{E}(r)$ et par suite le potentiel ψ

II.4- Méthode de calcul de ϵ_e en utilisant le vecteur déplacement $\vec{D}(r)$ et par suite le potentiel Φ

III - Propriétés de la fonction caractéristique géométrique

III.1- Dérivées de $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ et de $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$

III.2 - Pôle des fonctions $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ et $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$

IV - Cas d'un système à deux phases

IV.1- Forme analytique de la fonction $m(h)$

IV.2 - Les limites de la constante diélectrique effective

IV.2.a - Recherche des limites dans le cas où $h = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}$

IV.2.b - Recherche d'autres limites par le changement du rôle des phases

IV.2.c - Discussion

Conclusion

Chapitre III - CONDUCTIVITE ELECTRIQUE EFFECTIVE D'UN MELANGE A DEUX PHASES

I- Introduction

II- Calcul de la conductivité électrique effective par une méthode électrostatique

III- Introduction sur la théorie de percolations

III.1 - Théorie de la percolation

III.2- Processus de diffusion - Processus de percolation

III.3- Terminologie

III.3.a - Milieu de percolation

III.3.b. Définitions de l'amas et du périmètre d'amas

III.3.c - Probabilité de percolation $P(p)$

III.3.d - Concentration critique de percolation P_c

III.4 - Exposants critiques

III.5 Nombres d'amas rayons d'amas-profile de densité-périmètre d'amas

III.6 - Concept universel - Constantes universelles

IV- Conduction comme percolation

V - Modèle de réseau de résistances

V.1-Origine de l'association du réseau de résistances aux milieux inhomogènes

V.2- Modèle de percolation de liaisons appliqué aux réseaux de résistances

V.3 - Deux techniques numériques pour le calcul de $G(p)$ et $P(p)$

V.3.a - Première technique numérique pour le calcul de $G(p)$

V.3.b - Deuxième technique numérique pour le calcul de $P(p)$

V.3.c - Discussion sur les deux dernières techniques numériques

VI - Théorie du milieu effectif

VII - Application de la théorie du milieu effectif aux réseaux de résistances variables

VIII - Approximation à une seule liaison

VIII.a - Cas général

VIII.b - Application aux systèmes présentant des seuils de percolation

IX- Détermination de la conductivité effective dans le cas d'un système présentant un seuil de percolation

Chapitre IV - CONDUCTION PAR SAUT DANS LES SYSTEMES DESORDONNES

I- Notions de base sur les systèmes désordonnés

Modèles et mécanismes de conceptions

I.1 - Etat cristallin état non cristallin (ou désordonné)

I.2 - Modèles de base des systèmes non cristallins

I.2.1 - Modèle de la répartition aléatoire en position des centres

I.2.2 - Modèle du potentiel Gaussien de bruit blanc

I.2.3 - Modèle d'Anderson

I.3 - Modèles de structures de bandes dans les systèmes désordonnés

I.3.1 - Modèle de : Cohen-Fritzsche-Ovshinsky (C.F.O)

I.3.2 - Modèle de Mott et Davis

I.4 - Mécanismes de conduction dans les structures désordonnés

I.4.1 - Conduction dans les états délocalisés

I.4.1.1 - Conduction dans les états très délocalisés

I.4.1.2 - Conduction dans les états peu délocalisés

I.4.2 - Conduction dans les états localisés

I.4.2.1 - Etats très localisés

I.4.2.2 - Etats peu localisés

I.4.3 - Conduction par saut à distance variable

II - Conduction par saut dans les systèmes désordonnés

II.1 - Introduction

II.2 - Expression de la conductivité en fonction de la température : Loi de Mott

II.3 - Mécanisme de conduction par saut

II.4 - Conductivité

II.4.a - Formulation par un réseau de résistances

II.4.b - Invariant dimensionnel

II.4.c - Evaluation de la loi de la conductivité par la théorie de percolation

III - Conduction par hopping dans les métaux granulaires

Régime diélectrique en présence d'un champ électrique faible

III.1 - Généralités

III.1.1 - Régime métallique

III.1.2 - Régime de transition

III.1.3 - Régime diélectrique

III.1-3.a - Caractéristiques du matériau

III.1.3.b - Conductivité en régime diélectrique sous un champ électrique faible

Conclusion générale

Bibliographie

INTRODUCTION GENERALE

L'étude des matériaux composites a commencée il y a plus d'un siècle et les efforts ont vu de concevoir de nouveaux produits n'ont cessé d'être soutenus. Et c'est surtout dans les années soixante dix du siècle dernier, suite à la crise pétrolière, qu'un intérêt très particulier a été porté sur ces matériaux. L'industrie des plastiques avait traversait à l'époque une crise profonde liée à l'embargo de 1973, qui avait provoqué un manque de matière première.

L'application des composites s'étend de l'industrie du sport à l'aérospatial. Aussi, les propriétés électriques des composites métal isolant, comportant des particules métalliques ou des fibres conductrices dispersées aléatoirement dans une matrice isolante, sont sujet à de nombreuses études aussi bien de la part des physiciens travaillant dans le domaine de la physique du solide, pour des raisons théoriques, que de la part des ingénieurs des polymères, pour des applications industrielles.

Le succès des matériaux composites provient de la possibilité d'obtenir des propriétés très diverses en fonction des caractéristiques des phases constituantes. La caractéristique effective d'un matériau composite ne dépend pas seulement des propriétés physiques de ses constituants, mais elle est également déterminée par la micro géométrie d'un tel système hétérogène.

Il s'agit principalement des formes d'inclusions, et de leur fraction volumique. Ainsi, la caractéristique effective du matériau et une fonction très complexe, dépend de ces facteurs, et difficile à décrire.

Notre travail porte précisément sur les propriétés diélectriques des matériaux hétérogènes, et plus particulièrement sur leur permittivité effective.

Le problème du calcul de la constante diélectrique effective ϵ_e d'un milieu inhomogène constitué de plusieurs phases de formes quelconques et ayant chacune une constante diélectrique ϵ_i , est discuté dans la deuxième partie de notre travail d'une manière mathématique et ceci en introduisant une fonction caractéristique géométrique, qui exprime la dépendance de ϵ_e des autres constantes diélectriques ϵ_i .

Mais les équations pour des cas physiques très différents ont exactement la même forme, ce qui veut dire qu'ayant étudié un sujet ; comme celui par exemple de la constante

diélectrique effective, nous avons du même coup une connaissance d'un autre sujet comme celui de la perméabilité magnétique effective ou la conductivité électrique effective, etc.....

Une représentation analytique de la fonction caractéristique géométrique a été trouvée à partir de l'analyse de ses propriétés mathématiques ; dans le cas d'un milieu à deux phases. L'étude des variations linéaire de cette fonction nous a conduit à la détermination des limites de la constante diélectrique effective en fonction des fractions de volume et des constantes diélectriques de chaque phase.

Dans une troisième partie nous avons considéré un cas particulier de milieu à deux phases composé de deux types régions de formes sphériques.

L'approximation du milieu effectif (A M E) à une seule liaison ; est une méthode analytique efficace qui nous permet d'aboutir à une valeur exacte de la conductance électrique effective en fonction des fractions de volume et des conductances de chaque phase.

La théorie de percolation, théorie des phénomènes stochastiques, est une branche de théorie de probabilités qui semble s'adapter aux systèmes physiques ;[26] ; [27] ; [28].

Basée essentiellement sur des concepts mathématiques tels que les calculs statistiques et l'évaluation des configurations géométriques ; cette théorie est facilement abordable et ne demande pas de connaissance des sciences physiques.

La théorie de percolation permet de traduire le comportement des propriétés du système considéré lors de son passage d'une phase à l'autre ; [26] ; [27] ; [29] ; [30]et plus particulièrement leur comportement arrivés à un certain stade de transformation appelé seuil de percolation.

Les seuils de percolation ont été étudié formellement par Broadbent et Hammersley [25] où ils ont introduit les modèles de réseaux pour un jet de fluide à travers un milieu aléatoire statique, et ils ont vu rigoureusement que si la concentration du milieu actif est inférieure à une certaine valeur critique non nulle, alors aucun fluide ne peut couler.

L'étude de la conduction dans les mélanges ayant une phase non conductrice par approximation du milieu effectif (A M E) à une seule liaison ; est une méthode analytique qui nous permet de prévoir une bonne description des phénomènes de transport se déroulant à l'intérieur des systèmes présentant des seuils de percolation, et ceci en associant au milieu en question un réseau cubique aléatoire.

Nous passons dans une quatrième partie à l'étude du phénomène de conduction par saut qui se produit aux basses températures pour les systèmes cristallins et amorphes.

Ce phénomène se rencontre également dans les systèmes granulaires aussi bien pour des températures élevées que pour des températures basses. L'approche qui semble actuelle-

ment la plus utilisée dans l'étude de ce mécanisme de conduction est la percolation à partir de laquelle nous aboutissons à la loi de Mott et aux métaux granulaires [22], [18], [19], [20], [21]

Enfin, nous terminons notre travail par la donnée d'une table de référence.

Chapitre I

**Propriétés d'un seul milieu
homogène sous l'influence
d'un champ électrique**

I - Introduction

Avant d'aborder les milieux inhomogènes, nous pensons utile de discuter dans cette première partie les propriétés d'un seul milieu homogène de constante diélectrique ϵ sous l'influence d'un champ électrique.

II - La constante diélectrique

Nous allons discuter les propriétés de la matière sous l'influence d'un champ électrique, et plus précisément nous allons nous intéresser aux corps isolants.

Les expériences de Faraday montrèrent que la capacité d'un condensateur se trouvait augmentée par l'introduction d'un isolant entre les plateaux. Si l'isolant occupe tout l'espace entre les plateaux, la capacité est multipliée par un facteur ϵ_r , qui ne dépend que de la nature de l'isolant.

Les isolants sont aussi appelés diélectriques ; le facteur ϵ_r est alors une propriété du diélectrique ; et on l'appelle la constante diélectrique relative ou permittivité relative par rapport au vide. La constante diélectrique du vide est prise pour l'unité. Notre problème consiste maintenant à expliquer pourquoi il se produit un effet électrique si les isolants sont effectivement des isolants et ne conduisent pas l'électricité.

Pour cela partons du fait expérimental que la capacité est augmentée et cherchons à trouver par le raisonnement ce qui peut se passer. Soit un condensateur plan dont les surfaces des conducteurs portent des charges que nous supposerons négatives sur le plateau supérieur et positives sur le plateau inférieur. Soit d la distance entre les plateaux et soit A l'aire de chacun d'eux. La capacité d'un tel condensateur est:

$$C = \epsilon_0 A / d$$

la charge et la tension du condensateur sont reliées par :

$$Q = C.V$$

Le fait expérimental est que si nous plaçons un morceau de matière isolante telle que du plexiglas ou du verre entre les plateaux, nous trouvons que la capacité est plus élevée. Ceci signifie ; évidemment, que la tension est plus faible pour la même charge. Mais la différence de potentiel est l'intégrale du champ électrique à travers le condensateur, nous devons donc en conclure qu'à l'intérieur du condensateur, le champ électrique est diminué alors même que les charges sur les plateaux restent inchangées.

Nous allons expliquer ce phénomène en utilisant le théorème de Gauss ; ce théorème dit que le flux du champ électrique est directement lié aux charges intérieures. Considérons la surface de Gauss S représentée sur la figure I.1. Comme le champ électrique est diminué quand le diélectrique est présent, nous concluons que la charge totale à l'intérieur de la surface doit être plus petite que ce qu'elle serait sans diélectrique. Il n'y a qu'une seule conclusion possible c'est qu'il doit y avoir des charges positives sur la surface du diélectrique, Comme le champ est diminué mais pas annulé, nous devons nous attendre à ce que cette charge positive soit plus petite que la charge négative sur le conducteur.

Ainsi les phénomènes peuvent être expliqués si on peut comprendre pourquoi, quand un diélectrique est placé dans un champ électrique, il y a une charge positive qui est induite sur l'une des surfaces et une charge négative sur l'autre.

Ceci nous donne un modèle évident pour ce qui arrive avec un diélectrique. C'est à dire qu'à l'intérieur de la matière diélectrique il y a de nombreuses petites couches de matière conductrice.

L'ennui avec un tel modèle, c'est qu'il contient un axe particulier ; la normale aux couches ; alors que la plupart des diélectriques n'ont pas un tel axe.

Cette difficulté peut cependant être éliminée si on suppose que tous les isolants contiennent de petites sphères conductrices séparées les unes des autres par de l'isolant, comme le montre la figure I-2

L'existence de la constante diélectrique est expliquée par l'effet de charges qui seraient induites sur chaque sphère.

Ceci est l'un des plus anciens modèles physiques des diélectriques utilisés pour expliquer le phénomène observé par Faraday. Plus précisément ; on supposait que chacun des atomes de la matière était un conducteur parfait ; mais isolé des autres. La constante diélectrique ϵ devait dépendre de la fraction d'espace qui était occupée par des sphères conductrices.

III - Le vecteur polarisation \vec{P} :

Chacune des petites sphères agit comme un dipôle dont le moment est induit par le champ extérieur. La seule chose qui soit essentielle pour comprendre les diélectriques est qu'il y a de nombreux petits dipôles dans la matière. Donnons cependant ici un exemple pour illustrer un mécanisme possible. Un atome possède une charge positive sur son noyau, qui est entourée par des électrons négatifs. Dans un champ électrique, le noyau sera donc attiré dans un sens et les électrons dans l'autre. Les orbites des électrons seront quelque peu déformées et le centre de gravité des charges négatives sera déplacé et ne coïncidera plus avec la charge positive du noyau. Une telle configuration est équivalente en première approximation à un petit dipôle.

On suppose que le champ n'est pas trop important pour que la valeur du moment dipolaire induite soit proportionnelle au champ.

On va maintenant supposer que dans chaque atome il y a des charges q séparées par une distance L ; de sorte que (qL) est la moment dipolaire par atome.

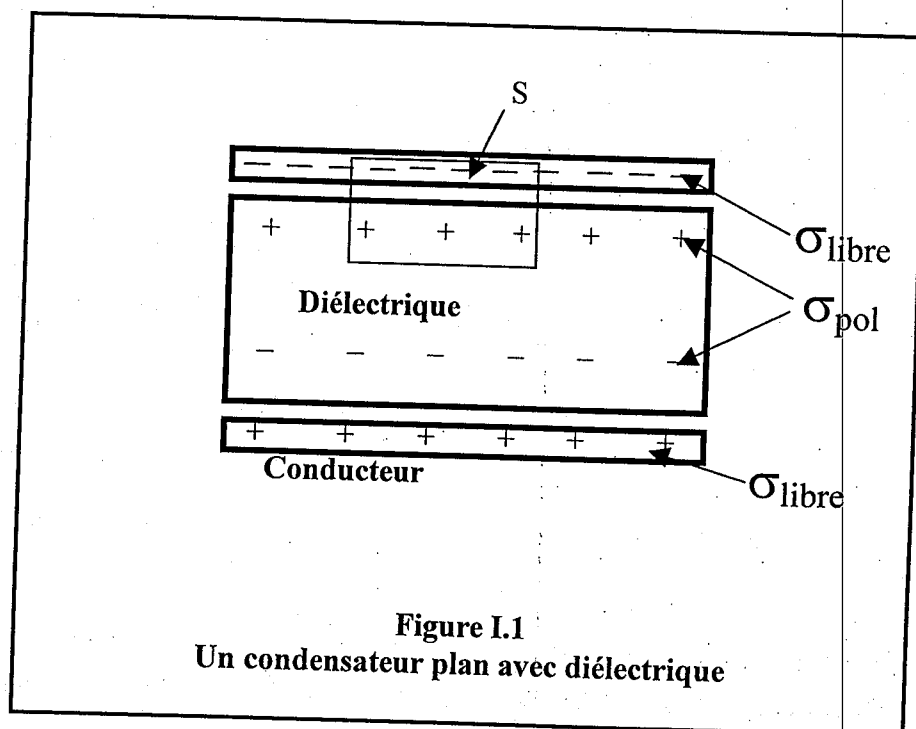


Figure I.1
Un condensateur plan avec diélectrique

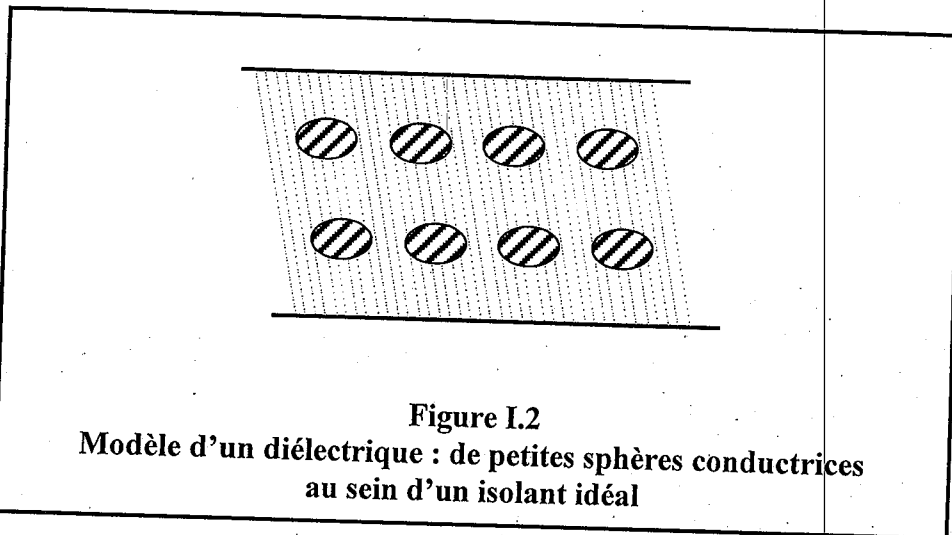


Figure I.2
Modèle d'un diélectrique : de petites sphères conductrices
au sein d'un isolant idéal

S'il y a N atomes par unité de volume ; il y aura un moment dipolaire par unité de volume égal à (NqL) , Ce moment dipolaire par unité de volume sera représenté par un vecteur.

$$\vec{P} = N \cdot q \cdot \vec{L}$$

En général, \vec{P} variera de place en place dans le diélectrique, Cependant, en tout point de la matière, \vec{P} est proportionnel au champ électrique \vec{E} . La constante de proportionnalité, qui dépend de la facilité avec laquelle les électrons se déplacent, va dépendre de la nature des atomes qui se trouvent dans le matériau.

Ce qui déterminera effectivement la façon dont se comporte cette constante de proportionnalité ; jusqu'à quel point elle est constante pour des champs très grands et ce qui se passe à l'intérieur de différents matériaux.

IV - Polarisation des diélectriques :

Considérons maintenant une lame diélectrique placée dans un champ électrique \vec{E}_0 . Ce champ extérieur va provoquer, par influence, une orientation des molécules du diélectrique. A l'intérieur du diélectrique et malgré cette modification ; l'ensemble des charges conservera une neutralité globale. Par contre ; sur chacune des faces du diélectrique il apparaît un ensemble de charges de signes contraires créant un champ induit \vec{E}' opposé au champ inducteur. Le champ résultant est alors :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}'$$

Eq I-1

\vec{E} : est appelé le champ effectif à l'intérieur du diélectrique. On peut le mettre en évidence en mesurant la différence de potentiel entre les deux faces de la lame. \vec{E}' peut se calculer par le théorème de Gauss en tenant compte de toutes les charges réparties dans le diélectrique, considérées comme si elles étaient placées dans le vide. Seules sont significatives les charges superficielles, ce qui amène à l'expression suivante :

$$E' = \frac{\sigma_{pol}}{\epsilon_0}$$

Supposons maintenant la lame diélectrique placée entre les armatures d'un condensateur produisant le champ E_0 (Figure I.1), avec :

$$E_0 = \frac{\sigma_{libre}}{\epsilon_0}$$

si : σ_{libre} est la densité surfacique de charges du condensateur.

Donc :

$$E = \frac{\sigma_{libre}}{\epsilon_0} - \frac{\sigma_{pol}}{\epsilon_0} = \frac{E_0}{\epsilon_r} = \frac{\sigma_{libre}}{\epsilon_0 \epsilon_r} = \frac{\sigma_{libre}}{\epsilon}$$

De cette formule on tire :

$$\epsilon_r = \frac{\sigma_{libre}}{\sigma_{libre} - \sigma_{pol}}$$

Eq I-2

Où ϵ_r la constante diélectrique apparaît comme le rapport de la charge du condensateur à la différence entre cette charge et celle qui est induite sur la surface du diélectrique. Le fait que

σ_{pol} Soit toujours inférieur à σ_{libre} justifie l'introduction du coefficient ϵ_r , toujours supérieur à l'unité.

V- Les trois vecteurs électriques :

L'équation
$$E = \frac{\sigma_{libre} - \sigma_{pol}}{\epsilon_0} = \frac{\sigma_{libre}}{\epsilon}$$
 montre que le champ effectif dépend du milieu considéré. Il s'ensuit que dans le cas d'un milieu comportant plusieurs diélectriques ; l'expression du champ effectif ne sera pas la même dans tout l'espace. C'est le cas de notre étude ultérieure.

Cherchons maintenant à déterminer une relation entre le vecteur déplacement \vec{D} ; le champ électrique effectif \vec{E} et le vecteur polarisation \vec{P} .

Pour cela :

On sait d'après le paragraphe précédent que :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}'$$

Soit :
$$\epsilon_0 \vec{E} = \epsilon_0 \vec{E}_0 + \epsilon_0 \vec{E}'$$

En introduisant : - Un vecteur déplacement \vec{D} tel que $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}_0$ (et $D = \sigma_{libre}$).

- Un vecteur polarisation \vec{P} tel que $\vec{P} = -\epsilon_0 \vec{E}'$ (et $P = \sigma_{pol}$).

Il vient donc : $\epsilon_0 \vec{E} = \vec{D} - \vec{P}$ que l'on écrit plus fréquemment sous la forme :

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

Eq I-3

Cette formule est générale et peut s'appliquer dans n'importe quel milieu diélectrique où \vec{E} est associé à toutes les charges.

\vec{D} est associé uniquement aux charges libres.

\vec{P} est associé uniquement aux charges de polarisation (\vec{P} est donc nul dans le vide).

VI - Cas où la polarisation \vec{P} n'est pas constante :

Dans le cas où la polarisation \vec{P} n'est pas partout la même ; nous devons en général nous attendre à trouver une densité de charges dans le volume du diélectrique, parce qu'il peut y avoir plus de charges qui entrent d'un côté d'un petit élément de volume que de charges qui en sortent de l'autre côté.

Essayons de calculer la charge gagnée ou perdue par un petit volume : Calculons d'abord la charge qui traverse une surface imaginaire quand la matière est polarisée. La charge qui traverse une surface est \vec{P} fois l'aire si la polarisation est normale à la surface. Evidemment, si la polarisation est tangente à la surface, aucune charge ne la traverse.

Avec les mêmes raisonnements que ceux que nous avons déjà utilisés ; on peut dire que la charge qui traverse n'importe quel élément de surface est proportionnelle à la composante de \vec{P} normale à la surface,

Donc dans le cas général on a :
$$\sigma_{pol} = \vec{P} \cdot \vec{n}$$

où : \vec{n} est un vecteur unitaire normal à la surface (figure I-3).

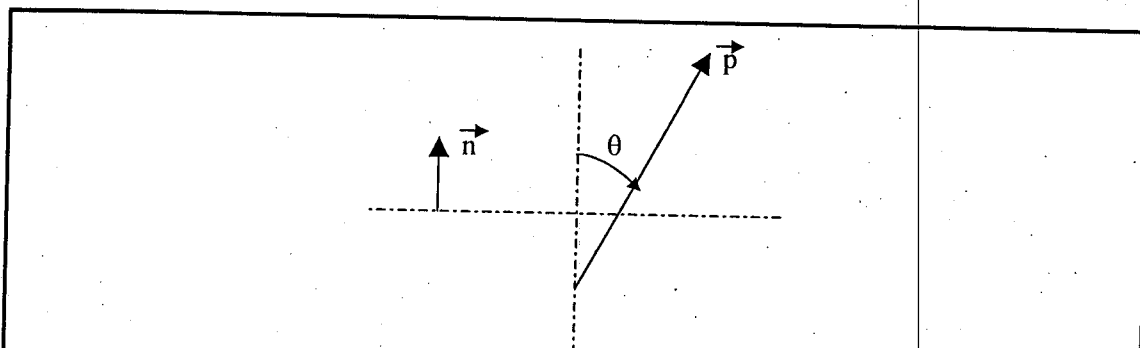


Figure I-3

La charge qui traverse un élément de surface imaginaire dans un diélectrique est proportionnelle à la composante de \vec{P} normale à la surface

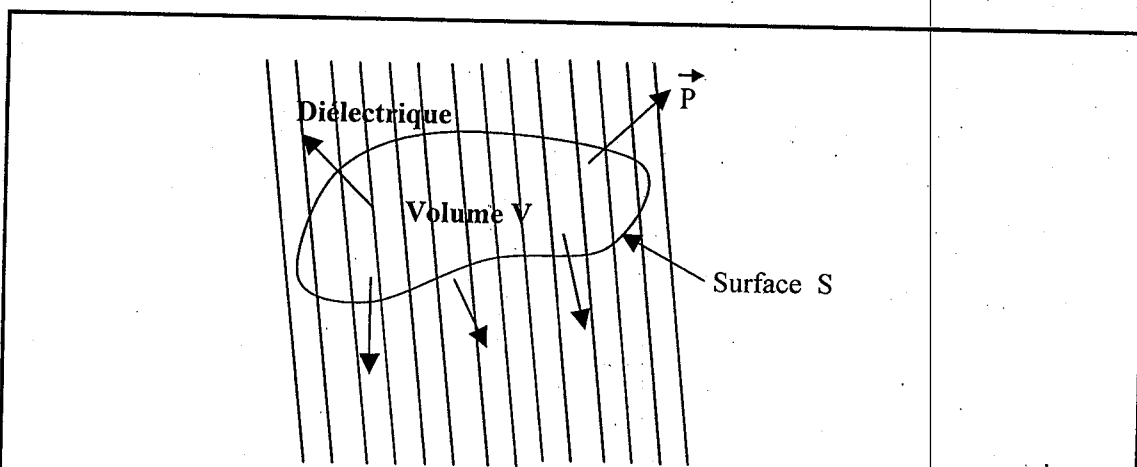


Figure I-4

D'une polarisation non uniforme \vec{P} peut résulter une charge totale à l'intérieur d'un diélectrique.

Les déplacements de charges peuvent cependant avoir pour résultante une densité volumique de charge. La charge totale qui sort d'un volume quelconque V par polarisation est l'intégrale de la composante de \vec{P} sur la normale extérieure à la surface S qui limite le volume (figure I-4). Il reste cependant un excès de charges égal et de signe opposé, Soit ΔQ_{pol} la charge totale à l'intérieur, nous écrivons :

$$\Delta Q_{pol} = - \int_S \vec{P} \cdot \vec{n} da$$

où : da est un élément de surface.

Nous pouvons attribuer ΔQ_{pol} à une distribution de charge volumique de densité ρ_{pol} et ainsi :

$$\Delta Q_{pol} = \int_V \rho_{pol} dV$$

La combinaison de ces deux dernières équations conduit à :

$$\int_V \rho_{pol} dV = \int_S \vec{P} \cdot \vec{n} da$$

Nous obtenons ainsi une sorte de théorème de Gauss qui relie la densité de charge d'un morceau de diélectrique polarisé au vecteur polarisation \vec{P} .

Et en utilisant le théorème mathématique :

$$\int_S \vec{P} \cdot \vec{n} da = \int_V \nabla \cdot \vec{P} dV$$

On trouve :

$$\rho_{pol} = -\nabla \cdot \vec{P}$$

Donc s'il existe une polarisation non uniforme ; sa divergence donne la densité de charge parfaitement réelle apparaissant dans la matière

VII - Les équations électrostatiques en présence de diélectrique :

Combinons maintenant le résultat ci-dessus avec la théorie de l'électrostatique.

L'équation fondamentale de l'électrostatique est :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

Eq I-4

ρ est ici la densité volumique de toutes les charges électriques, qui peut être séparées en deux parties: ρ_{pol} la densité de charge volumique due aux polarisations non uniformes, et ρ_{libre} toutes les autres charges.

L'équation (Eq I-4) devient alors :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho_{libre} + \rho_{pol}}{\epsilon_0} = \frac{\rho_{libre} - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}}{\epsilon_0} \text{ ou } \vec{\nabla} \cdot \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{\epsilon_0} \right) = \frac{\rho_{libre}}{\epsilon_0}$$

Eq I-5

L'équation pour le rotationnel de \vec{E} est :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = \vec{0}$$

Eq I-6

On suppose que \vec{P} est en fait proportionnel à \vec{E} . Cette proportionnalité s'écrit habituellement sous la forme suivante :

$$\vec{P} = \chi \epsilon_0 \vec{E}$$

Eq I-7

Où χ est la susceptibilité électrique du diélectrique.

Tirant \vec{P} de l'équation (I-7), nous obtenons l'équation suivante plus simple

$$\vec{\nabla} \cdot [(1 + \chi) \cdot \vec{E}] = \vec{\nabla} \cdot [\epsilon_r \cdot \vec{E}] = \frac{\rho_{\text{libre}}}{\epsilon_0} \quad \text{Eq I-8}$$

On ne peut pas faire sortir la constante diélectrique relative ϵ_r de la divergence car cette dernière peut ne pas être la même partout ; c'est le cas des milieux inhomogènes.

Sous la forme que nous avons donnée ; les équations s'appliquent au cas général où différents diélectriques peuvent être placés en différents endroits dans l'espace. Les équations peuvent alors être très difficiles à résoudre.

Nous avons exprimé dans l'équation (I-3) le vecteur déplacement \vec{D} sous la forme d'une combinaison linéaire de \vec{E} et \vec{P} comme suit :

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

Par conséquent, les équations (I-5) et (I-6) s'écrivent sous une forme apparemment très simple :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{\text{libre}} \quad \text{Et} \quad \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = \vec{0} \quad \text{Eq. I-9}$$

On peut résoudre ces deux dernières équations seulement dans le cas où on donne une troisième équation pour la relation entre \vec{D} et \vec{E} . Cette relation est obtenue après avoir supposé que \vec{P} est proportionnel à \vec{E} , (c'est à dire que l'équation (I-7) est vérifiée).

Cette relation entre \vec{D} et \vec{E} . Peut s'écrire comme e suit :

$$\vec{D} = \epsilon_0 (1 + \chi) \cdot \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E}$$

Cette équation s'écrit habituellement sous la forme :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$$

Eq I-10

VIII - Conclusion

L'étude des propriétés d'un milieu homogène sous l'influence d'un champ électrique, nous a permis d'aboutir aux équations fondamentales de l'électrostatique. Ces équations vont être utilisées dans la suite de notre travail sur chacune des phases composant un milieu inhomogène pour l'évaluation des propriétés électriques de ce milieu.

Chapitre II

**Introduction de la fonction
caractéristique géométrique pour
exprimer la dépendance
de la constante diélectrique
effective en fonction des
constantes diélectriques du milieu**

I – Introduction :

Nous avons discuté dans la première partie de notre travail les propriétés d'un seul milieu homogène de constante diélectrique ϵ sous l'effet d'un champ électrique et nous sommes arrivés aux équations fondamentales de l'électrostatique.

Passons maintenant à quelque chose de beaucoup plus compliqué en prenant un milieu inhomogène constitué de plusieurs phases ayant chacune une constante diélectrique ϵ_i , et plaçons le entre les armatures d'un condensateur portant une densité superficielle de charge σ_{libre} .

L'étude de ce milieu inhomogène n'est pas facile à faire et ceci à cause de la variation de la constante diélectrique d'une phase à l'autre, mais cependant on peut simplifier ce système en lui faisant correspondre un milieu homogène effectif de constante diélectrique ϵ_e .

Le problème du calcul de la constante diélectrique effective ϵ_e d'un matériau hétérogène est discuté d'une manière mathématique, cette dernière constante diélectrique, effective est fonction des constantes diélectriques ϵ_i des composants homogènes constituant le milieu en question et qui dépendent de la géométrie microscopique des composants.

Nous introduisons une fonction caractéristique géométrique qui exprime la dépendance de ϵ_e des autres constantes diélectriques ϵ_i . Mais les équations pour des cas physiques très différents ont exactement la même forme. Bien sûr, les symboles peuvent être distincts. Une lettre en remplace une autre, mais la forme mathématique des équations est la même. Ce qui veut dire qu'ayant étudié un sujet ; comme celui par exemple de la constante diélectrique effective, nous avons du même coup une connaissance d'un autre sujet comme celui de la perméabilité magnétique effective, ou la conductivité électrique effective, etc.

Une représentation analytique de la fonction caractéristique géométrique a été trouvée à partir de l'analyse de ses propriétés mathématiques dans le cas d'un milieu à deux phases. Des limites de la constante diélectrique effective ont été tirées à partir de cette représentation analytique.

II- La fonction caractéristique géométrique :

II.1- Introduction du milieu effectif en utilisant le champ électrique :

Nous considérons un milieu inhomogène formé de plusieurs phases ayant chacune une constante diélectrique ϵ_i et plaçons le entre les armatures d'un condensateur portant une densité de charge superficielle σ_{libre} , donc d'après ce qui a été déjà étudié dans la première partie de notre travail, nous pouvons affirmer que le champ électrique effectif résultant à l'intérieur du milieu n'est pas partout constant, et que ce dernier prend une valeur constante pour chaque phase.

Et l'aspect le plus important du problème intervient dans le fait qu'il faut utiliser les équations fondamentales de l'électrostatique (I.9), (I.10) à chaque phase du système.

Nous allons supposer qu'il n'y a pas de densité de charge volumique libre donc

$\rho_{libre} = 0$, ces deux équations s'écrivent sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0 \\ \vec{D} = \epsilon \vec{E} \end{cases} \quad \vec{\nabla} \wedge \vec{E} = \vec{0}$$

La même structure mathématique existe dans le cas de la conduction électrique, où les quantités $\vec{E}, \vec{D}, \epsilon$ seront remplacées par \vec{E}, \vec{J} (courant électrique), σ (conductivité).

Le processus de la diffusion moléculaire a aussi la même structure, les quantités appropriées sont maintenant :

- $\vec{\nabla} n$ où n est la densité des espèces diffusées.
- Le courant de diffusion J.
- Le coefficient de diffusion D.

Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser au problème en terme de $\vec{E}, \vec{D}, \epsilon$.

Nous allons maintenant discuter les propriétés électriques d'un milieu hétérogène formé de plusieurs phases de formes quelconques et de constantes diélectriques

ϵ_i ($i = 1, \dots, k$) en lui faisant correspondre un milieu effectif homogène de constante diélectrique ϵ_e .

La constante diélectrique effective ϵ_e peut nous conduire à déterminer une valeur correcte de l'énergie électrostatique totale emmagasinée quand le matériau est placé entre les plaques d'un condensateur portant une densité de charge superficielle. [1]

Comme le milieu effectif représente en quelque sorte une moyennisation du milieu initial hétérogène, nous allons exprimer cette moyennisation sur le champ électrique, le vecteur déplacement et sur l'énergie électrostatique emmagasinée par le matériau à partir des équations suivantes :

$$\begin{aligned}\vec{E}_0 &= \frac{1}{\Omega} \int \vec{E}(\vec{r}) d\omega \\ \epsilon_e \vec{E}_0 &= \frac{1}{\Omega} \int \epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}) d\omega \\ \epsilon_e \vec{E}_0^2 &= \frac{1}{\Omega} \int \epsilon(\vec{r}) \vec{E}^2(\vec{r}) d\omega\end{aligned}$$

Eq II-1

où Ω représente le volume total, $d\omega$ représente un élément de volume

Dans ces trois dernières équations :

- $\vec{E}(\vec{r})$ représente le champ électrique effectif (déjà défini dans la première partie) et il varie d'une phase à l'autre dans le matériau, ce champ est produit après avoir fixé un potentiel entre les plaques du condensateur.
- $\epsilon(\vec{r})$ est la constante diélectrique locale du système et elle varie d'une phase à l'autre.
- \vec{E}_0 est le champ effectif uniforme qui pourrait exister dans le milieu homogène effectif après avoir appliqué un même potentiel entre les plaques du condensateur.

II.2 – Introduction du milieu effectif en utilisant le vecteur déplacement :

Nous pouvons avoir une autre expression de l'énergie électrostatique emmagasinée dans le matériau, en écrivant la relation entre champ électrique et vecteur déplacement comme suit :

$$\vec{D}_0 = \epsilon_e \vec{E}_0 \quad \text{et} \quad \vec{D}(\vec{r}) = \epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})$$

Nous aboutissons donc à l'expression suivante :

$$\frac{\vec{D}_0^2}{\epsilon_e} = \frac{1}{\Omega} \int \frac{\vec{D}^2(\vec{r})}{\epsilon(\vec{r})} d\omega \quad \text{Eq II-2}$$

où $\vec{D}(\vec{r})$ est le vecteur déplacement variable dans le matériau hétérogène,

\vec{D}_0 est le vecteur déplacement uniforme qui pourrait exister pour un milieu homogène effectif avec un même nombre total de charges déposées sur les plaques du condensateur.

II.3 - Méthode du calcul de ϵ_e en utilisant le champ électrique $\vec{E}(\vec{r})$ et par suite le potentiel

ψ :

La constante diélectrique locale $\epsilon(\vec{r})$ a une valeur fixe ϵ_e dans chaque phase i ; cependant on peut l'écrire sous la forme suivante :

$$\epsilon(\vec{r}) = \theta_\epsilon(\vec{r}) = \sum_{i=1}^k \theta_i \epsilon_i \quad \text{Eq. II.3}$$

où $\theta_i(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{Si } \vec{r} \text{ est à l'intérieur de la phase } i \text{ du matériau} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$

On a évidemment :

$$\sum_{i=1}^k \theta_i(\vec{r}) = 1$$

Si on veut calculer ϵ_e en utilisant l'équation Eq II-1 ; on doit en premier lieu chercher le champ $\vec{E}(\vec{r})$ en résolvant l'équation différentielle partielle suivante :

$$\vec{\nabla}(\epsilon \vec{E}) = 0$$

Eq II-4

et pour cela on va utiliser le raisonnement suivant :

Plaçons sur toutes les portions de constante diélectrique ϵ_i ($i = 1 \dots k$) du milieu hétérogène un des diélectriques ϵ_i par exemple ϵ_k ; et on va donc définir les constantes diélectriques relatives suivantes par rapport à la phase k :

On aura donc :

$$\begin{cases} h_i = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_k} \\ h_k = 1 \end{cases} \quad \text{où} \quad i = 1, \dots, k-1$$

Appelons $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ une fonction qui contient toutes, les informations géométriques du milieu hétérogène et qui sera utilisée pour le calcul de la constante diélectrique effective ϵ_e , ou toutes autres quantités mathématiques similaires comme la perméabilité magnétique effective ; conductivité électrique, etc...

$m(h_1, \dots, h_{k-1})$ est appelée fonction caractéristique géométrique du composé et définie par :

$$m = \frac{\varepsilon_e}{\varepsilon_k} = \frac{1}{\Omega} \int \frac{\sum_{i=1}^k \theta_i \varepsilon_i \vec{E}^2(\vec{r})}{\varepsilon_k E_0^2} d\omega \quad \text{Eq II-5}$$

$$m = \frac{\varepsilon_e}{\varepsilon_k} = \frac{1}{\Omega} \int \theta h (\vec{\nabla} \Psi)^2 d\omega \quad \text{Eq II-6}$$

où :

$$\begin{cases} \theta h = \frac{\varepsilon(\vec{r})}{\varepsilon_k} = \sum_{i=1}^k \theta_i h_i & \text{Eq II-7} \\ \vec{E} = |E_0| \vec{\nabla} \Psi & \text{Ep II-8} \end{cases}$$

Cette dernière équation peut être en quelque sorte traduite par le fait que le rotationnel de \vec{E} est nul donc $\vec{E}(\vec{r})$ dérive d'un certain potentiel ψ .

Le problème qui était la détermination de ε_e à partir du champ électrique $\vec{E}(\vec{r})$ revient maintenant au calcul de ε_e à partir du potentiel comme le montre l'équation. Eq II-6

$$\vec{\nabla}(\varepsilon \vec{E}) = 0 \Rightarrow \vec{\nabla}(\theta_h \varepsilon_k |E_0| \vec{\nabla} \Psi) = 0 \Rightarrow \vec{\nabla}(\theta_h \vec{\nabla} \Psi) = 0$$

Donc il existe un potentiel ψ dont le gradient multiplié par une fonction scalaire θ_h a une divergence égale à zéro. Et ψ satisfait aux conditions suivantes :

$$\begin{cases} \vec{\nabla}(\theta_h \vec{\nabla} \Psi) = 0 \\ \Psi = 0, L \\ \text{aux deux plaques du condensateur séparées d'une distance égale à } L \end{cases} \quad \text{Eq II-9}$$

II.4- Méthode de calcul de ϵ_e en utilisant le vecteur déplacement \vec{D} et par suite le potentiel Φ :

D'autres résultats peuvent être obtenus si nous voulions calculer ϵ_e à partir de la définition exposée dans l'équation Eq II-2

Nous introduisons dans ce cas le potentiel Φ comme suit :

$$\frac{1}{m} = \frac{\epsilon_k}{\epsilon_e} = \frac{1}{\Omega} \int \frac{D^2(\vec{r})}{D_0^2} \frac{\epsilon_k}{\epsilon(\vec{r})} d\omega$$

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\Omega} \int \frac{1}{\theta_h} \frac{D^2(\vec{r})}{D_0^2} d\omega$$

et en posant :

$$\vec{D} = |D_0| \theta_h \vec{\nabla} \phi$$

Eq II-10

nous aurons donc :

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\Omega} \int \theta_h (\vec{\nabla} \phi)^2 d\omega = \frac{\epsilon_k}{\epsilon_e}$$

Eq II-11

D'où finalement nous pouvons calculer ϵ_e à partir du potentiel Φ comme le montre l'équation II-11.

$$\vec{\nabla} \vec{D} = 0 \Rightarrow \vec{\nabla} [D_0 | \theta_h \vec{\nabla} \phi] = 0 \Rightarrow \vec{\nabla} [\theta_h \vec{\nabla} \phi] = 0$$

Il existe donc un potentiel Φ dont le gradient multiplié par une fonction scalaire θ_h a une divergence égale à zéro.

Le potentiel Φ satisfait aux conditions suivantes :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} [\theta_h \vec{\nabla} \phi] = \mathbf{0} \\ \phi = \text{const} \end{cases} \quad \text{aux deux plaques du condensateur. Eq II-12}$$

III - Propriétés de la fonction caractéristique géométrique :

Nous allons maintenant examiner en détail les propriétés de la fonction caractéristique géométrique et les appliquer au cas d'un système à deux phases.

III.1- Dérivées de $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ et de $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$:

Pour des valeurs arbitraires de h_i , le problème exposé en Eq II-9 a une solution et la fonction caractéristique géométrique aura une dérivée donnée par :

$$\frac{\partial m}{\partial h_i} = \frac{1}{\Omega} \int \theta_i (\vec{\nabla} \Psi)^2 d\omega \quad \text{Eq II-13}$$

Similairement ; le problème exposé en (Eq II-12) aura une solution pour des valeurs arbitraires de h_i et la fonction suivante :

$$\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1}) = \frac{1}{m} \quad \text{avec :} \quad \tilde{h}_i = \frac{1}{h_i}$$

a une dérivée donnée par la forme suivante :

$$\frac{\partial \tilde{m}}{\partial \tilde{h}_i} = \frac{1}{\Omega} \int \theta_i (\theta_h \vec{\nabla} \phi)^2 d\omega \quad \text{Eq II-14}$$

Ainsi la fonction $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ ou $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$ est analytique en chaque point où le problème exposé en (Eq II-9) ou en (Eq II-12) a une solution, nous parlons dans ce cas d'un point régulier. Et nous pouvons déterminer dans ce cas là, la valeur exacte de la constante diélectrique effective ϵ_e .

Dans le cas général où (Eq II-9) et (Eq II-12) ont des solutions, nous pouvons montrer que Φ est proportionnel à ψ pour cela :

Ψ est solution de (Eq II-9)

$$\Rightarrow \vec{\nabla} [\theta_h \vec{\nabla} \Psi] = 0 \Rightarrow \theta_h \vec{\nabla} \Psi = \vec{U}$$

où : \vec{U} est un vecteur constant.

Φ est solution de (Eq II-12)

$$\Rightarrow \vec{\nabla} [\theta_h \vec{\nabla} \phi] = 0 \Rightarrow \theta_h \vec{\nabla} \phi = \vec{V}$$

où : \vec{V} est un vecteur constant.

Donc $\vec{\nabla} \Phi = \frac{\vec{V}}{\theta_h} = \frac{\vec{V}}{\vec{U}} \vec{\nabla} \Psi$ d'où Φ est proportionnel à Ψ

III.2 - Pôle des fonctions $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ et $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$:

Dans un cas particulier où la solution de l'équation suivante :

$$\begin{cases} \vec{\nabla} [\theta_h \vec{\nabla} \phi] = 0 \\ \phi = 0, \text{const.} \end{cases} \quad \text{aux deux plaques du condensateur}$$

est $\Phi = 0$ et qui représente la solution sur la plaque du condensateur ; montrons que $\tilde{m} = 0$.

Pour cela transformons l'équation suivante donnée au paragraphe II-4.

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\Omega} \int \theta_h (\vec{\nabla} \phi)^2 d\omega$$

en une intégrale de surface, comme suit :

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\Omega} \int \phi^* \theta_h \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{\nabla} \phi ds \text{ et } \phi = 0 \Rightarrow \tilde{m} = 0 \quad \text{d'où : } m = \infty$$

$$m = \infty$$

donc l'équation :

$$\vec{\nabla}(\theta_h \vec{\nabla} \Psi) = 0$$

n'a pas de solution, un tel point est un pôle et il représente un point singulier pour la fonction $m(h_1, \dots, h_{k-1})$.

Une discussion similaire montre que la fonction $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$ a un pôle c'est-à-dire que $\tilde{m} = \infty$ à chaque fois que l'équation :

$$\vec{\nabla}(\theta_h \vec{\nabla} \phi) = 0$$

n'a pas de solution ; un tel point représente un point singulier pour la fonction $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$.

La seule autre possibilité pour un point singulier de $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ et $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$ peut se présenter en un certain point où les équations exposées en (Eq II-9) et (Eq II-12) n'ont pas de solution, mais nous sommes incapables d'offrir une preuve définitive et nous pouvons toujours supposer que ce cas ne peut jamais se produire.

Durant ce paragraphe nous avons vu que les pôles représentent les seules singularités pour les fonctions $m(h_1, \dots, h_{k-1})$ et $\tilde{m}(\tilde{h}_1, \dots, \tilde{h}_{k-1})$ en incluant les points à l'infini, nous pouvons donc représenter m et \tilde{m} comme des fonctions rationnelles de leurs variables.

IV - Cas d'un système à deux phases :

Considérons maintenant le cas où l'on a un système à deux phases ; il y a donc une seule variable h , et nous pouvons exprimer θ_h comme suit : $\theta_h = h\theta_1 + \theta_2$ (Eq II-15)

Commençons par montrer que $m(1)=1$:

Dans le cas où $h = 1$ alors $\theta_h = 1$ donc :

$$\vec{\nabla}(\theta_h \vec{\nabla}\Psi) = 0$$

a une solution qui est $\psi(r,1) = x$ et cependant :

$$m(1) = \frac{1}{\Omega} \int d\omega = 1$$

On va maintenant montrer que les pôles de $m(h)$ sont tous situés sur l'axe réel négatif et sont des pôles simples :

Pour cela, utilisons à chaque pôle la solution de (Eq II-12),

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{\Omega} \int (h\theta_1 + \theta_2)(\vec{\nabla}\phi)^2 d\omega = 0$$

Cette dernière intégrale ne peut s'annuler que si h est réel et négatif. Pour chaque valeur de h ;

l'équation (Eq II-14) montre que $\frac{d\tilde{m}}{d\tilde{h}}$ est positive ; donc la fonction $\tilde{m}(\tilde{h})$ a un simple zéro et la fonction $m(h)$ a un simple pôle.

IV.1- Forme analytique de la fonction $m(h)$:

Pour déterminer les limites de la fonction $m(h)$ et éventuellement ceux de la constante diélectrique effective ϵ_e , nous devons en premier lieu trouver une forme analytique pour la fonction $m(h)$ qui satisfait aux conditions déjà citées dans les paragraphes précédents et qui se résume comme suit :

- La valeur de la fonction caractéristique géométrique au point $h=1$ est égale à 1 donc $m(1)=1$.

- La fonction caractéristique géométrique est croissante $\frac{dm}{dh} > 0$.

- Les pôles de $m(h)$ sont tous simples et situés sur l'axe réel négatif.

- La fonction $m(h)$ s'écrit sous une forme rationnelle de la variable h .

Cette dernière fonction aura la forme suivante :

$$m(h) = 1 - \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}(1-h)}{1 - S_{\alpha}(1-h)}$$

où : $B_{\alpha} > 0$ et $0 \leq S_{\alpha} < 1$ Eq.II-16

Nous pouvons facilement vérifier que la représentation choisie pour la fonction $m(h)$ satisfait bien aux conditions déjà imposées.

Mais pour discuter les propriétés de ϵ_e , il est plus commode d'utiliser les différentes variables et fonctions suivantes :

$$\begin{cases} u = 1 - h \\ f(u) = 1 - m \end{cases}$$

D'après la représentation faite pour $m(h)$; nous pouvons alors en déduire celle de $f(u)$ comme suit :

$$f(u) = \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha} u}{1 - u S_{\alpha}} = \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{\frac{1}{u} - S_{\alpha}} \quad (\text{Eq II-17})$$

On pose : $S = \frac{1}{u}$ et finalement on aboutit à la forme suivante pour la fonction $f(u)$; cette dernière représente comme $m(h)$ une fonction caractéristique géométrique.

$$F(S) = f(u) = \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{S - S_{\alpha}}$$

où : $B_{\alpha} > 0$ et $1 > S_0 > S_1 > \dots > S_m \geq 0$

Pour passer à l'étude physique du problème, nous devons trouver la relation entre les paramètres mathématiques donnés dans le problème, c'est à dire (B_{α}, S_{α}) d'une part et les constantes du matériau d'une autre part, et pour cela :

- Exprimons le développement limité de la fonction :

$$f(u) = \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{\frac{1}{u} - \frac{1}{u_{\alpha}}}$$

au voisinage de l'origine.

$$f(u) = u \sum_{\alpha} B_{\alpha} + u^2 \sum_{\alpha} B_{\alpha} S_{\alpha} + 0(u^3) \quad (\text{Eq II-18}).$$

- Le développement de la fonction. $f(u)$ est le suivant : [2]

$$f(u) = p_1 u + \frac{1}{3} p_1 p_2 u^2 + 0(u^3) \quad (\text{Eq II-19})$$

où p_1 et p_2 représentent respectivement les fractions de volume dans les phases 1 et 2. En comparant ces dernières équations, nous constatons que l'on doit poser :

$$\begin{cases} \sum_{\alpha} B_{\alpha} = P_1 \\ \sum_{\alpha} B_{\alpha} S_{\alpha} = \frac{1}{3} P_1 P_2 \end{cases} \quad \text{Eq II-20}$$

IV.2 - Les limites de la constante diélectrique effective :

IV.2.a - Recherche des limites dans le cas où $h = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}$:

Pour déterminer les limites de la constante diélectrique effective ; nous devons commencer par chercher ceux de $F(S)$ en procédant par la manière suivante :

Nous calculons la variation linéaire de la fonction $F(S)$ pour une valeur fixe S assujetti aux contraintes imposées par les conditions (Eq II-20). Nous ferons ce calcul en supposant que S_{α} et B_{α} peuvent avoir de petites variations δS_{α} et δB_{α} ; et nous utiliserons (Eq II-20) pour éliminer δS_0 et δB_0 dans le résultat de δF :

$$F(S) = \sum_{\alpha} \frac{B_{\alpha}}{S - S_{\alpha}} = \frac{B_0}{S - S_0} + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{B_{\alpha}}{S - S_{\alpha}}$$

Calculons la différentielle de $F(S)$ par rapport à $B_0, S_0, B_{\alpha}, S_{\alpha}$

$$\delta F(S) = \frac{1}{S - S_0} \delta B_0 + \frac{B_0}{(S - S_0)^2} \delta S_0 + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\delta B_{\alpha}}{(S - S_{\alpha})} + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{B_{\alpha} \delta S_{\alpha}}{(S - S_{\alpha})^2}$$

$$\text{Eq. II-20} \Rightarrow \delta B_0 = - \sum_{\alpha \neq 0} \delta B_{\alpha}$$

$$\text{et : } B_0 \delta S_0 + S_0 \delta B_0 + \sum_{\alpha \neq 0} S_{\alpha} \delta B_{\alpha} + \sum_{\alpha \neq 0} B_{\alpha} \delta S_{\alpha} = 0$$

$$\Rightarrow B_0 \delta S_0 = \sum_{\alpha \neq 0} (-S_\alpha \delta B_\alpha - B_\alpha \delta S_\alpha) + S_0 \sum_{\alpha \neq 0} \delta B_\alpha$$

donc

$$\delta F(S) = \frac{-\sum_{\alpha \neq 0} \delta B_\alpha}{(S - S_0)} + \frac{1}{(S - S_0)^2} \sum_{\alpha \neq 0} (-B_\alpha \delta S_\alpha - S_\alpha \delta B_\alpha + S_0 \delta B_\alpha) + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{\delta B_\alpha}{(S - S_\alpha)} + \sum_{\alpha \neq 0} \frac{B_\alpha \delta S_\alpha}{(S - S_\alpha)^2}$$

$$\delta F(S) = \sum_{\alpha \neq 0} \delta B_\alpha \left(\frac{-1}{S - S_0} - \frac{S_\alpha}{(S - S_0)^2} + \frac{S_0}{(S - S_0)^2} + \frac{1}{(S - S_\alpha)} \right) + \sum_{\alpha \neq 0} \delta S_\alpha \left(\frac{-B_\alpha}{(S - S_0)^2} + \frac{B_\alpha}{(S - S_\alpha)^2} \right)$$

D'où finalement :

$$\delta F(S) = \sum_{\alpha \neq 0} \delta B_\alpha \left(\frac{S_\alpha - S_0}{S - S_0} \right)^2 \frac{1}{S - S_\alpha} + \sum_{\alpha \neq 0} B_\alpha \delta S_\alpha \frac{(S_0 - S_\alpha)(S_0 + S_\alpha - 2S)}{(S - S_\alpha)^2 (S - S_0)^2}$$

EqII-21

Nous allons maintenant chercher le maximum ou le minimum de F(S) en variant indépendamment tous les B_α et S_α avec $\alpha \neq 0$.

Supposons que $S > 1$ alors le coefficient de δB_α dans l'équation (Eq II-21) est toujours positif et en prenant $\delta B_\alpha < 0$ nous aurons toujours $\delta F < 0$. Donc F(S) sera une fonction décroissante et la borne inférieure de F(S) sera obtenue en prenant $B_\alpha = 0$ pour tous les $\alpha \neq 0$; ceci nous élimine les S_α pour $\alpha \neq 0$; et B_0 et S_0 seront déterminés à partir des conditions imposées en Eq.II-21

$$\begin{cases} B_0 = P_1 \\ B_0 S_0 = \frac{1}{3} P_1 P_2 \end{cases} \quad (\text{Eq II-22})$$

D'où finalement on aura la limite suivante pour la fonction F(S) dans le cas où :

$$S > 1 : \frac{P_1}{S - \frac{1}{3}P_2} \langle F(S) \rangle \quad (\text{Eq II-23})$$

Supposons maintenant que $S < 0$; le coefficient de δB_α dans (Eq II-21) est négatif et en prenant $\delta B_\alpha < 0$ nous aboutissons à $\delta F > 0$.

La borne supérieure de $F(S)$ sera obtenue en prenant $B_\alpha = 0$ pour tous les $\alpha \neq 0$;

D'où finalement la limite supérieure de la fonction $F(S)$ dans le cas où $S < 0$ est :

$$\frac{P_1}{S - \frac{1}{3}P_2} \rangle F(S) \quad (\text{Eq. II.24})$$

Discutons maintenant ces deux derniers résultats en terme de $\epsilon_e, \epsilon_1, \epsilon_2$:

$S > 1$ on a trouvé :

$$\frac{P_1}{S - \frac{1}{3}P_2} \langle F(S) \rangle$$

Commençons par écrire les relations de correspondances entre $(S, F(S))$ d'une part et $(h, m(h))$ d'une autre part.

$$\left\{ \begin{array}{l} S = \frac{1}{u} = \frac{1}{1-h} \\ F(S) = 1 - m \end{array} \right. \text{ avec : } h = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \quad \text{et : } m(h) = \frac{\epsilon_e}{\epsilon_2}$$

donc :

$$S = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_2 - \epsilon_1}$$

$$F(S) = 1 - \frac{\epsilon_e}{\epsilon_2}$$

Donc pour $S > 1$ c'est-à-dire $0 < \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} < 1$ on aura :

$$\epsilon_e < \epsilon_2 + \frac{3 p_1 \epsilon_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{3 \epsilon_2 + p_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)} \quad \text{Eq II-25}$$

$S < 0$ on a trouvé :

$$\frac{P_1}{S - \frac{1}{3} P_2} > F(S)$$

En prenant les mêmes correspondances que précédemment on aboutit au résultat suivant :

Pour $\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} > 1$ on aura :

$$\epsilon_e > \epsilon_2 + \frac{3 p_1 \epsilon_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)}{3 \epsilon_2 + p_2 (\epsilon_1 - \epsilon_2)} \quad \text{Eq.II-26}$$

IV.2.b - Recherche d'autres limites par le changement du rôle des phases :

D'autres limites peuvent être obtenues en changeant les rôles des deux phases. Ce changement de phases va se traduire à l'aide des expressions suivantes :

$$\begin{cases} S \\ F(S) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} S' = \frac{1}{1-h'} \\ F(S') = 1-m' \end{cases} \quad \text{Eq II-27}$$

avec :

$$\begin{cases} h' = \frac{1}{h} = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} \\ m' = \frac{\epsilon_e}{\epsilon_1} \end{cases} \quad \text{Eq.II-28}$$

Nous allons essayer de déduire les limites de $F(S')$ à partir de celles déjà calculées pour $F(S)$, et ceci en calculant S' en fonction de S et $F(S')$ en fonction de $F(S)$.

- Calcul de S' en fonction de S :

$$S' = \frac{1}{1-h'} = \frac{h}{h-1} = 1 + \frac{1}{h-1} = 1 - S$$

- Calcul de $F(S')$ en fonction de $F(S)$:

$$F(S') = \frac{\epsilon_1 - \epsilon_e}{\epsilon_1} = \frac{h\epsilon_2 - \epsilon_e}{h\epsilon_2} = \frac{\epsilon_2 - \epsilon_e - \epsilon_2 + h\epsilon_2}{h\epsilon_2} = \frac{1}{h} F(S) + \frac{h-1}{h}$$

Or :

$$\begin{cases} h - 1 = -\frac{1}{S} \\ h = \frac{S - 1}{S} \end{cases}$$

Donc finalement nous aboutissons à l'expression suivante pour $F(S')$ fonction de $F(S)$:

$$F(S') = \frac{1 - SF(S)}{1 - S}$$

Donc ce changement de phase va se traduire par les transformations suivantes :

$$S \text{ -----} > 1-S$$

$$F(S) \text{ -----} > \frac{1 - SF(S)}{1 - S}$$

En utilisant les limites de F(S) données en (EqII-23) et (EqII-24) et les dernières relations de transformations nous aboutissons à :

$$\frac{P_2}{1 - S - \frac{1}{3}P_1} \left\langle \frac{1 - SF(S)}{1 - S} \right. \quad \text{pour : } 1-S > 1 \text{ c'est à dire } S < 0$$

$$\text{et : } \frac{P_2}{1 - S - \frac{1}{3}P_1} \left. \right\rangle \frac{1 - SF(S)}{1 - S} \quad \text{pour : } 1-S < 0 \text{ c'est à dire } S > 1$$

Exprimons ces derniers résultats en termes de $\epsilon_e, \epsilon_1, \epsilon_2$:

$$\epsilon_e \left. \right\rangle \epsilon_1 + \frac{3p_2 \epsilon_1 (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{3\epsilon_1 + p_1(\epsilon_2 - \epsilon_1)} \quad \text{pour : } 0 \left\langle \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left\langle 1 \quad \text{Eq. II.29}$$

$$\epsilon_e \left\langle \epsilon_1 + \frac{3p_2 \epsilon_1 (\epsilon_2 - \epsilon_1)}{3\epsilon_1 + p_1(\epsilon_2 - \epsilon_1)} \quad \text{pour : } \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \left\langle 1 \quad \text{Eq. II.30}$$

IV.2.c – Discussion :

La fonction caractéristique géométrique est un outil mathématique très efficace, car en étudiant ses variations linéaires nous avons pu déterminer les limites de la constante diélectrique effective en fonction des fractions de volume et des constantes diélectriques de chaque phase comme suit :

$$\varepsilon_1 + \frac{3p_2\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{3\varepsilon_1 + p_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} < \varepsilon_e < \varepsilon_2 + \frac{3p_1\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{3\varepsilon_2 + p_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} \quad \text{pour : } \varepsilon_1 < \varepsilon_2$$

Eq. II.31

$$\varepsilon_2 + \frac{3p_1\varepsilon_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{3\varepsilon_2 + p_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)} < \varepsilon_e < \varepsilon_1 + \frac{3p_2\varepsilon_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{3\varepsilon_1 + p_1(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)} \quad \text{pour : } \varepsilon_1 > \varepsilon_2$$

Eq. II.32

On arrive à la conclusion suivante : " Aucune loi proposée jusqu'à présent sur les mélanges n'a pu donner une description exacte sur le comportement diélectrique d'un mélange hétérogène, et nous sommes amenés dans chaque cas à déterminer les paramètres particuliers. Cependant, on a trouvé que ses résultats se trouvaient toujours entre deux limites qui coïncident avec celles exposées ci-dessus.

L'indétermination de la constante effective est liée nécessairement aux propriétés de la situation physique ; résultant du fait que généralement nous n' avons aucune information sur la distribution spatiale des phases ainsi que sur la forme des régions composants le matériau.

Nous pensons que cette indétermination ne peut pas être réduite sans informations physique supplémentaires.

Conclusion :

La fonction caractéristique géométrique est un outil mathématique qui nous a permis de préciser le domaine de variation de la constante diélectrique effective dans un cas très général d'un milieu à deux phases, c'est à dire sur lequel nous n'avons aucune information sur la distribution spatiale des phases ainsi que sur la forme des régions composants le milieu.

Nous avons présenté nos arguments en termes de la constante diélectrique, il faut cependant noter que tous les résultats trouvés sont aussi applicables aux cas de la perméabilité magnétique ; conductivité électrique et thermique. Cette équivalence vient du fait que les équations de base gouvernant les distributions des champs électriques ou magnétiques, ou les gradients de température etc.... ; sont identiques ; mais il y a seulement la signification des quantités qui change d'une situation physique à une autre.

Chapitre III

Conductivité électrique effective d'un mélange à deux phases

I- Introduction :

Dans toute la troisième partie de notre travail, nous allons nous intéresser à la conductivité électrique effective d'un mélange à deux phases.

Nous avons déterminé dans la deuxième partie le domaine de variation des constantes effectives d'un système très général à deux phases, et nous avons dit que l'indétermination de ces constantes effectives était due au fait que généralement nous n'avons aucune information sur la distribution spatiale ces phases ainsi que sur la forme des régions composant le système.

Nous allons maintenant dans cette troisième partie essayer de lever cette indétermination en considérant un cas particulier de système à deux phases composé de deux types de régions de formes sphériques dans le cas d'un système à trois dimensions.

Nous commençons par déterminer la conductivité effective dans le cas d'un système à deux phases ayant des inclusions sous formes sphériques.

Nous donnons des rappels sur la théorie de percolation, et puis par l'application du modèle de percolation de liaisons aux réseaux de résistances, nous présentons une technique qui consiste à déterminer la conductivité d'un milieu à deux phases présentant un seuil de percolation.

L'approximation du milieu effectif à une seule liaison est présentée comme une méthode analytique efficace qui nous permet de prévoir une bonne description des phénomènes de transport se déroulant à l'intérieur d'un milieu inhomogène à deux phases.

II- Calcul de la conductivité électrique effective par une méthode électrostatique :

Le problème de la résistance d'un mélange métallique binaire a pris l'attention de plusieurs chercheurs depuis plus d'un siècle. Quelques théories sur ces mélanges ont été mises au point, et elles ont été testées par comparaison avec l'expérience.

Nous allons présenter une situation dans laquelle de petites portions d'une phase homogène, notées par 1, sont mélangées à des portions similaires d'une seconde phase, notées par 2. Nous supposons que les deux types de matériaux remplissent tout l'espace.

Nous considérons donc le dernier mélange typique dans lequel les matériaux peuvent être vu microscopiquement et sont assez larges de manière à ce qu'il n'y ait pas de problème au sujet de l'application de la théorie de la conductivité macroscopique.

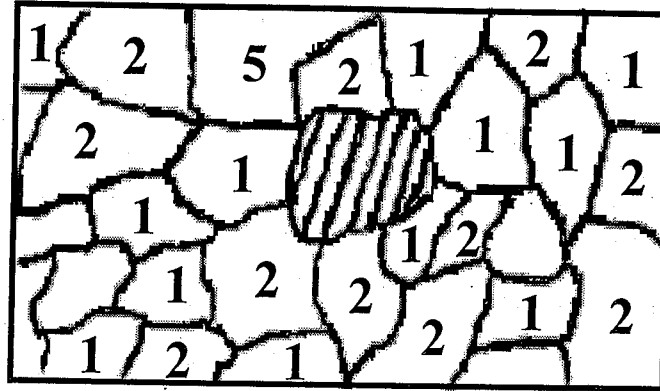


Figure III-1

La région hachurée de type 1 est entourée par deux types de région, et peuvent être imaginées comme remplacées par un seul milieu de conductivité uniforme

Nous allons décrire une équation pour la conductivité électrique effective σ_m qui décrit les deux phases d'une manière symétrique.[4]

Considérons la figure III-1, et qui représente la région hachurée de la phase 1, entourée par un assortiment des autres régions de deux types. Notre première supposition sera en sorte que nous pouvons traiter le voisinage de la région hachurée comme s'il s'agissait d'un milieu uniforme ayant une conductivité σ_m caractérisant le mélange.

La conductivité de la région hachurée est σ_1 , nous considérons la région hachurée comme une sphère de rayon a placée dans un milieu uniforme de conductivité σ_m .

Si le champ à travers l'inclusion est \vec{E}_m , nous pouvons affirmer à partir des considérations électrostatiques que le moment dipolaire associé à cette dernière région est :

$$\vec{E}_m a^3 \frac{\sigma_1 - \sigma_m}{\sigma_1 + 2\sigma_m}$$

S'il y a N_1 régions par unité de volume, la polarisation sera alors :

$$\vec{P}_1 = N_1 a^3 \vec{E}_m \frac{\sigma_1 - \sigma_m}{\sigma_1 + 2\sigma_m} = p_1 \vec{E}_m \frac{\sigma_1 - \sigma_m}{\sigma_1 + 2\sigma_m}$$

où P_1 est la fraction de volume de la phase 1.

Cette polarisation produit une déviation par rapport à \vec{E}_m correspondante au vecteur dépolarisant et égal à $-4\pi\vec{P}_1$. Donc cette polarisation conduit à une fluctuation par rapport au champ effectif \vec{E}_m

Ainsi si la valeur moyenne de la déviation par rapport à \vec{E}_m s'annule, le vecteur dépolarisant total sommé à travers les deux types d'inclusions s'annule ; ce qui donne l'équation suivante :

$$p_1 \frac{\sigma_1 - \sigma_m}{\sigma_1 + 2\sigma_m} + p_2 \frac{\sigma_2 - \sigma_m}{\sigma_2 + 2\sigma_m} = 0$$

Cette dernière équation peut être généralisée sans difficulté à un grand nombre de composants ce qui donne l'expression suivante :

$$\sum_i p_i \frac{\sigma_i - \sigma_m}{\sigma_i + 2\sigma_m} = 0$$

où l'indice i représente le nombre de composants.

Dans le cas d'un système à deux composants, nous obtenons l'équation du second degré en σ_m suivante :

$$4\sigma_m^2 + \sigma_m[\sigma_1(2-6p_1) + \sigma_2(2-6p_2)] - 2\sigma_1\sigma_2 = 0$$

Dont la solution est :

$$\sigma_m = \frac{1}{4} \{ (3p_1 - 1)\sigma_1 + (3p_2 - 1)\sigma_2 \} + \frac{1}{4} \{ [(3p_1 - 1)\sigma_1 + (3p_2 - 1)\sigma_2]^2 + 8\sigma_1\sigma_2 \}^{\frac{1}{2}}$$

Eq III-1

Nous avons donc déterminé la conductivité du milieu effectif σ_m après avoir supposé que la valeur moyenne du vecteur dépolarisant à travers les deux types d'inclusions était nulle. Une formule équivalente à celle exposée en (Eq III-1) a pu être obtenue dans la suite de notre travail pour la conductance électrique effective, et ceci, en utilisant non pas la déviation par

rapport au champ effectif \vec{E}_m mais la déviation par rapport au potentiel effectif V_m . Ceci sera fait après l'introduction des réseaux de résistances et approximation du milieu effectif à une seule liaison.

III- Introduction sur la théorie de percolation :

III.1 - Théorie de la percolation

Dans la littérature, percolation signifie infiltration ; faire passer un fluide à travers les pores d'un filtre ou d'un corps solide.

Dans les textes, nous trouvons souvent le mot "mouiller" au lieu de percoler, et nous dirons alors que le fluide mouille un corps poreux.

En d'autres termes, la théorie de la percolation essaie de décrire l'interaction des particules classiques (particules sans interactions entre elles) avec un milieu aléatoire. Elle permet de traduire le comportement des propriétés du système considéré lors de son passage d'une phase à une autre phase [5], [6], [7], [8], et plus particulièrement leur comportement arrivés à un certain stade de transformation appelé seuil de percolation.

Cette théorie est purement mathématique. Les milieux qu'elle aborde sont des systèmes mathématiques abstraits. Toutes les propriétés qu'elle permet de décrire telles que le nombre d'amas de dimensions à la concentration p , $n_s(p)$, leurs rayons relatifs $R_s(p)$, le périmètre d'amas $t_s(p)$ et le profil de densité $D_s(r,p)$ sont des entités purement mathématique déduites à partir des estimations statistiques et de l'évaluation du nombre de configurations géométriques possibles pour un amas de dimension donnée.

De plus, comme nous le verrons plus tard, cette théorie, [3], est à caractère descriptif ; elle ne donne que des lois phénoménologiques introduisant sept exposants dits critiques (α , β , γ , δ , ν , σ , τ) pour décrire le comportement critique des propriétés des amas pour $p = p_c$, cette théorie donne au maximum cinq relations liant ces exposants ; les deux autres σ et τ seront donnés par l'expérience (ou techniques numériques) et des lois asymptotiques seront données pour des systèmes infinis.

Jusqu'à présent, les techniques numériques qui sont d'un grand intérêt pour l'unité de cette théorie ne portaient que sur des réseaux communs tels que les réseaux carrés, triangulaires et parfois à nid d'abeilles. Et encore les estimations numériques microscopiques de Monte-Carlo qui furent bien adaptées ne portaient que sur des spécimens de dimensions finies. Aussi parmi les auteurs qui ont travaillé, sur cette théorie, Stauffer, pour donner les formes de variations des lois régissant les propriétés des amas, fit énoncer deux hypothèses

fondamentales appelées hypothèses de changement d'échelles, et toute la validité de cette théorie repose sur celle de ces hypothèses.

Nous ajoutons que si cette théorie semble être vérifiée pour les milieux percolatifs à deux dimensions, elle l'est loin d'être pour les milieux dont $d \geq 3$

III.2- Processus de diffusion - Processus de percolation

Comme la théorie de la percolation étudie l'interaction de particules avec un milieu aléatoire : l'on pense que le processus de percolation ressemble à celui de la diffusion. En effet, ces deux processus présentent des aspects similaires ; mais ceci n'empêche pas que leurs limites physiques soient bien différentes. Ces dernières sont bien discernées par une idéalisation mathématique simple qu'est le chemin unidimensionnel de Polya.

Ce chemin, (fig : III 2-a), consiste en une suite de points appelés objets ou atomes situés sur une ligne droite infinie. La distance entre deux plus proches voisins appelée aussi le pas est égale à l'unité et est identique pour tous les couples d'objets voisins ($j, j+1$).

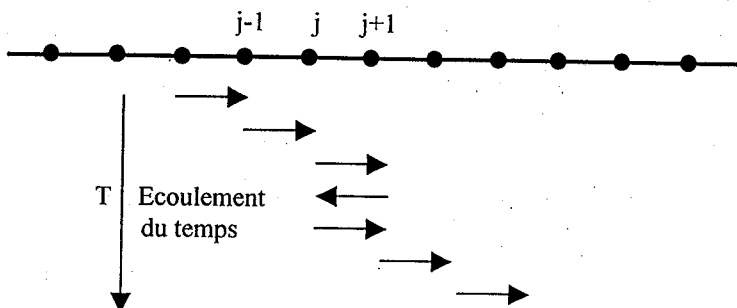
(-i) supposons que chaque point j de ce chemin a une probabilité $p = \frac{1}{2}$ d'être passant (ou conducteur) dans l'un des deux sens de la direction du chemin.

La particule se trouvant à l'instant t au point j a autant de chance de passer sur le point ($j-1$) que sur la point ($j+1$), (fig : III 2 - b). Ainsi la propagation de la particule ne dépend pas de l'emplacement des objets. Nous dirons alors que le milieu ne joue aucun rôle sur le mouvement de la particule ; qu'il est passif.

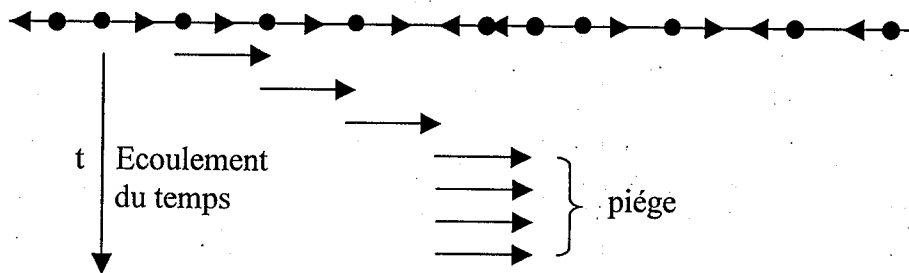
Autrement dit, le milieu ne présente pas de mémoire. Un tel phénomène caractérise le processus de diffusion.



a) :- chemin unidimensionnel de Polya.



b) Processus de diffusion



c) processus de percolation

Figure III-2 : Idéalisations mathématiques de Polya [7]

(-ii) Maintenant à chaque point j est adjointe une orientation privilégiée, schématisée par une flèche, (fige III 2-c). Une Particule se trouvant au point considéré ne peut se mouvoir que dans le sens de l'orientation, la probabilité de transfert étant égale pour toutes les orientations. La particule peut être piégée et subir une diffusion multiple alternée. Maintenant notre milieu n'est plus passif, il peut influencer sur la propagation de la particule. Ainsi le milieu présente une mémoire. Un tel phénomène est appelé processus de percolation.

Donc suivant que le milieu est actif ou passif, nous avons soit un processus de percolation, soit un processus de diffusion. Un exemple de diffusion est donné par la propagation d'une molécule dans un gaz dilué, le milieu étant associé à l'ensemble des autres

molécules. Puisque le milieu n'est pas toujours identique à lui même dans l'espace et le temps, la molécule ne pourrait se rappeler avec quelle autre particule elle vient de se heurter ni quand. Dans le même sens, un milieu de percolation serait tout simplement un gaz fortement concentré, et ainsi le milieu restera pratiquement identique à lui même dans le temps. Aussi nous pourrions considérer que « le mouvement d'une fourmi dans un labyrinthe » est un problème de percolation pour évaluer la conduction.

III.3- Terminologie :

Comme toutes les autres théories, celle de percolation possède son propre langage; et pour bien saisir l'essence de cette théorie, il fût jugé nécessaire de connaître les notions de milieu, de sites conducteurs, d'amas, de seuil de percolation, etc..... Dans ce qui suit, nous allons énoncer toute une gamme de définitions qui nous serviront lors de notre étude.

• : Site conducteur ; — liaison passante ; liaison interdite

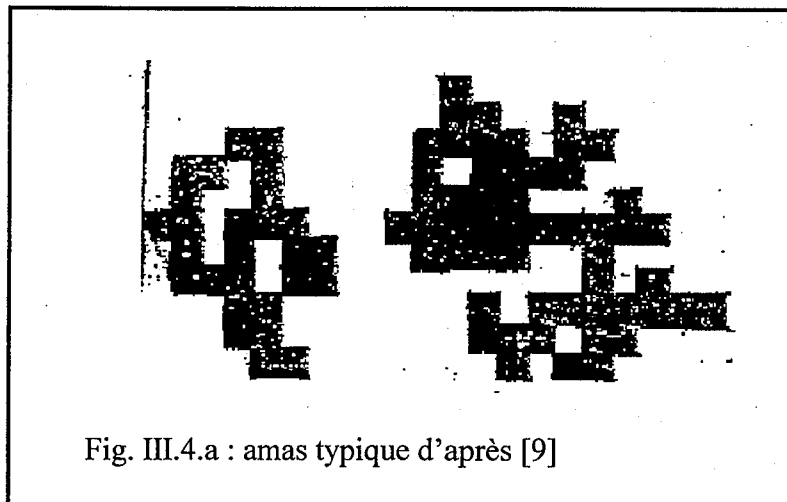


Fig. III.4.a : amas typique d'après [9]

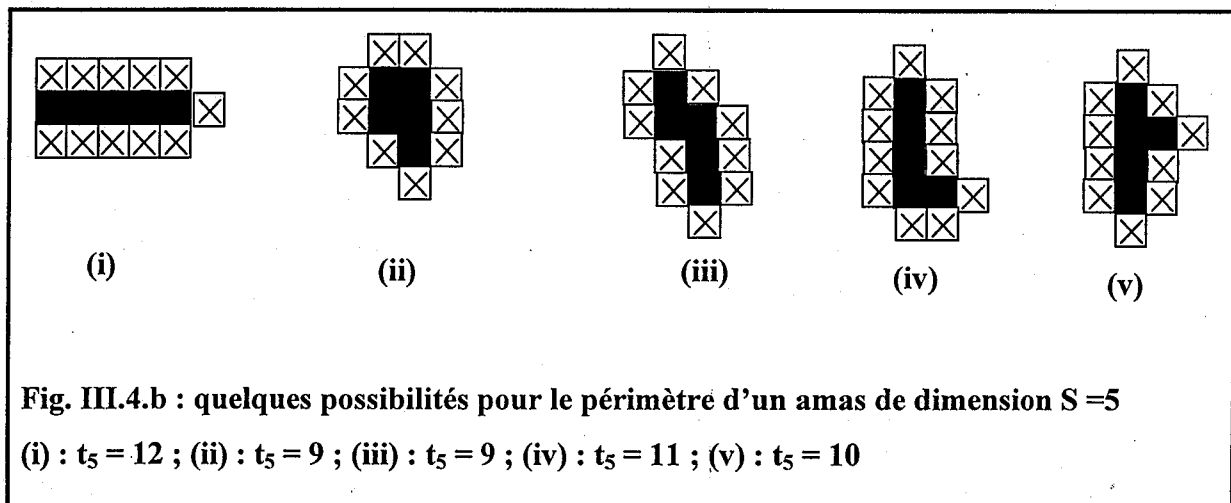


Fig. III.4.b : quelques possibilités pour le périmètre d'un amas de dimension $S=5$

(i) : $t_5 = 12$; (ii) : $t_5 = 9$; (iii) : $t_5 = 9$; (iv) : $t_5 = 11$; (v) : $t_5 = 10$

III.3.c - Probabilité de percolation $P(p)$

Partant d'un site conducteur pris au hasard $P(p)$ est la probabilité pour qu'à partir de ce site, le fluide mouille une infinité d'autres sites . C'est aussi la probabilité de trouver une séquence infinie de sites conducteurs.

$$P(p) = P_{\infty}(p) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_n(p)$$

III.3.d - Concentration critique de percolation P_c

Le caractère stochastique consiste donc à associer à des sites pris au hasard une probabilité $p=1-q$ d'être conducteurs. Dans les systèmes de percolation cette probabilité p représente le nombre de sites bâtis conducteurs par unité de sites du réseau considéré

$$P = \frac{\text{nombre de sites bâtis conducteurs}}{\text{nombre total de sites du réseau}}$$

que nous pourrions traduire par :

$$p = \frac{1}{1 + \frac{n}{\bar{n}}}$$

\bar{n} et n : étant respectivement le nombre de sites bâtis conducteurs et le nombre total de sites du réseau non-conducteurs lorsqu'aucun site du réseau n'est conducteur, $\bar{n} = 0$; $p = 0$.

Au fur et à mesure que l'on bâtit des sites conducteurs, la probabilité p augmente jusqu'à tendre finalement vers la valeur $p = 1$, et ceci lorsque tous les sites deviennent conducteurs. Ainsi le domaine de variation de p est compris dans l'intervalle $[0,1]$; et nous pensons que c'est pour cette raison que l'on appelle probabilité de percolation.

Du point de vue mathématique, le seuil de percolation p_c (ou probabilité critique) est la concentration à laquelle on est sûr d'avoir une séquence infinie ou un canal de percolation infini ; $P_c = \sup. \{ p, \text{ telle que } P(p) = 0 \}$.

Cette concentration P_c présente beaucoup d'intérêt physiques. Elle pourrait exprimer la limite inférieure de spins exigée pour que la transition de phase ferromagnétique ait lieu. Dans l'étude de la conduction dans les métaux granulaires, P_c pourrait être la fraction de volume métallique minimale demandée X_c pour que la conduction métallique soit prépondérante sur la conduction par sauts d'électrons d'un grain à un autre.

Cette dernière se traduit par une conductance critique lors de l'étude de la conduction par saut dans les réseaux à résistances aléatoires [10].

Dans les réseaux binaires aléatoires formés d'atomes de type S et d'atomes de type A P_c serait tout simplement la concentration limite inférieure d'atomes S nécessaire pour qu'un canal infini d'atomes type S prenne naissance sur un réseau d'atomes de type A.

Comme pour les métaux granulaires, P_c pourrait représenter la fraction de volume cristallisé minimale exigée pour qu'il y ait conduction métallique dans les systèmes à nucléations.

L'existence de plus d'un canal infini de percolation reste encore un problème non totalement résolu. Certaines études portant sur des cas bien particuliers suggèrent l'unicité d'un tel canal. Dans le cas d'un réseau unidimensionnel, il est aisé de voir qu'un tel canal est unique et qu'il apparaît pour $p_c = 1$. On montre [7], que l'existence simultanée d'un canal de type A et d'un autre de type B ne peut avoir lieu dans les alliages binaires aléatoires $A_x B_y$. L'unicité d'un tel canal est liée directement au processus aléatoire dont jouissent ces systèmes. Dans les systèmes à deux phases, le caractère stochastique fait en sorte que la disparition d'un canal propre à la phase initiale entraîne simultanément l'apparition d'un canal propre à la phase finale.

Aussi, comme nous le verrons plus tard, l'unicité d'un tel canal est d'une importance vitale pour expliquer l'asymétrie associée aux propriétés des amas lorsque l'on se trouve de part et d'autre de P_c .

III.4 - Exposants critiques

Nous avons vu que pour $P < P_c$ seuls les amas locaux existent, et pour des concentrations $P > P_c$, un canal infini de percolation fait son apparition.

La présence d'un tel amas infini signifie la prédominance des propriétés de la phase finale sur celles de la phase initiale.

En d'autres termes, pour $P > P_c$ (ou $q < 1 - P_c$) il existe un canal infini de percolation propre à la première phase et ainsi ce sont les propriétés relatives à cette phase qui vont régir celles du système global. L'apparition du canal à la seconde phase entraîne la prédominance des propriétés de cette dernière. D'après ce que nous venons de dire, nous remarquons que l'unicité d'un tel canal est importante pour l'étude des comportements des propriétés de ces systèmes.

L'existence de plus d'un canal de percolation d'une même phase implique nécessairement la présence d'un ou plus d'un canal infini pour l'autre phase ; et ainsi le comportement des propriétés serait analytique au seuil de percolation ; ce qui n'est pas le cas. En effet pour voir le comportement critique des propriétés considérons la transition de phase ferromagnétique. Avant d'atteindre la concentration critique X_c , les spins sont disposés en domaines locaux aléatoires (chaque domaines voit ses spins dirigés suivant une direction "quelconque" indépendamment des autres domaines) tels que globalement le système est

On appelle partie analytique de la fonction $f(r-r_0)$, la somme, des termes

$$a_0 + a_1 \times (r-r_0) + a_4 \times (r-r_0)^2$$

Le terme $a_2 \times (r-r_0)^{1,354}$ est appelé partie singulière de $f(r-r_0)$

Quant au terme $a_4 \times (r-r_0)^{1,825}$ c'est la correction apportée à la partie singulière.

Puisque nous ne nous intéressons qu'au comportement critique des propriétés des amas, nous n'avons pas à prendre en considération la partie analytique qui reflète le comportement "normal" des propriétés ; et nous la mettons dans l'état fondamental. Ainsi la relation (Eq III-3) prend la forme :

$$\left[\sum_s s n_s(p) \right]_{\sin g} \propto |P - P_c|^\beta ; P \rightarrow P_c \text{ et } s \text{ fini.} \quad \text{Eq III-4-a}$$

De la même manière que dans les transitions de phases thermiques, nous définissons le

k - ème moment $\sum_s s^k n_s(p)$ par:

$$\left[\sum_s n_s(p) \right]_{\sin g} \propto |P - P_c|^{2-\alpha} ; P \rightarrow P_c \text{ et } s \text{ infini.} \quad \text{Eq III-4-b}$$

qui correspondrait à une énergie libre puisque la chaleur spécifique diverge comme $(T_c - T)^{-\alpha}$.

$$\left[\sum_s S n_s(p) \right]_{\sin g} \propto |P - P_c|^{-\beta} ; P \rightarrow P_c \text{ et } s \text{ fini correspondrait à une}$$

magnétisation spontanée

$$\left[\sum_s S n_s(p) \right]_{\sin g} \propto |P - P_c|^{-\gamma} ; P \rightarrow P_c \text{ et } s \text{ fini.} \quad \text{Eq III-4-c}$$

qui se comporterait comme la susceptibilité magnétique

$$\left[\sum_s S n_s(p) \exp(-h_s) \right]_{\text{sing}} \underset{\text{sing}}{\sim} h^{\frac{1}{\nu}} ; h \rightarrow 0 \text{ et } p \rightarrow p_c \text{ et } s \text{ fini} \quad \text{Eq III-4-d}$$

où : h est appelé champ fictif ou " fantôme ".

La longueur de cohérence est définie par :

$$\xi(p) \underset{\text{sing}}{\sim} (p - p_c)^{-\nu} \quad \text{Eq III-4-e}$$

Les deux autres coefficients σ et τ seront introduits plus tard.

III-5 Nombres d'amas rayons d'amas-profile de densité-périmètre d'amas :

En suivant le raisonnement de D. Stauffer, [5], nous allons dans ce qui suit donner les formes de variations des lois liées aux nombres d'amas -s $n_s(p)$, à leurs rayons $R_s(p)$, au profile de densité $D_s(r, p)$ et à leurs périmètres $t_s(p)$.

Les lois suggérées par Stauffer reposent sur la validité de deux hypothèses à changement d'échelles prises pour les nombres d'amas et leurs rayons. Un postulat fût émis pour évaluer le profile de densité.

Dans leurs formes générale, ces hypothèses se présentent comme suit :

soit une fonction $f_\alpha(x_i)$ où α caractérise un ensemble de paramètres, x une variable aléatoire et i une gamme de valeur de x,

soit $X_{i\xi}$ une propriété typique de X_i et supposons qu'elle est unique pour X_i . Le changement

d'échelles consiste à passer de la fonction $\frac{f_\alpha(X_i)}{f_\alpha(X_{i\xi})}$ à la fonction $F_\alpha \left(\frac{X_i}{X_{i\xi}} \right)$ et

étudier sa variation au lieu de celle de $f_\alpha(X_i)$. Donc ce changement d'échelles ne serait valable que si $X_{i\xi}$ est unique et tant qu'il ne perturbe pas la nature de la fonction $f_\alpha(X_i)$.

A- NOMBRES D'AMAS

Nous pourrions remarquer d'après ce qu'il a été dit auparavant que l'étude du nombre d'amas s'étale sur trois parties : p dans le voisinage immédiat de p_c ($p \rightarrow p_c$) ; p au dessus de p_c ($p > p_c$) et p en dessous de p_c ($p < p_c$).

1 - Nombre d'amas pour $P \rightarrow P_c$

a) Fonction à changement d'échelles de Stauffer :

Pour pouvoir décrire le comportement des amas, Stauffer avait supposé que celui-ci pourrait être caractérisé par une dimension typique s_ξ et que l'on ne pourrait avoir plus d'une dimension typique :

$$s_\xi \propto |p - p_c|^{-\frac{1}{\sigma}} \quad \text{Eq III-5}$$

Autrement dit, toutes les définitions de cette dimension typique doivent 'diverger' avec le même exposant σ .

C'est la partie dominante dans l'étude des parties singulières des propriétés des amas, et dans la suite nous supposerons cette hypothèse valable. Le nombre moyen d'amas $n_s(p)$ s'écrit sous sa forme la plus générale :

$$\frac{n_s(p)}{n_{s_\xi}(p)} = f\left(\frac{s}{s_\xi}\right) \quad \text{Eq III-6}$$

Pour des raisons pratiques nous remplacerons $n_{s_\xi}(p)$ par $n_s(p_c)$, et comme :

$$\frac{s}{s_\xi} \propto S |p - p_c|^{\frac{1}{\sigma}}$$

nous prenons l'argument z tel que :

$$z = S^\sigma |p - p_c| \propto \epsilon \cdot S^\sigma \quad \epsilon = \frac{p - p_c}{p_c}$$

d'où :
$$n_s(p) \propto n_s(p_c) \cdot f(\epsilon \cdot S^\sigma) \quad \text{Eq III-7}$$

La fonction $f(\epsilon, s^\sigma)$ est appelée fonction de changement d'échelles de Stauffer. Ce qui est important de noter ici c'est que nous ne pourrions connaître la variation explicite de $f(\epsilon, s^\sigma)$ que par les estimations des techniques numériques. Il n'existe aucun moyen théorique qui peut donner directement cette variation. Le changement $n_{s\epsilon}(\epsilon, s^\sigma) \rightarrow n_s(\epsilon, s^\sigma)$ n'est justifié que par le fait que $n_s(p_c)$ est donné directement par l'expérience. En effet $n_s(p_c)$ est donné par:

$$n_s(p_c) \propto s^{-\tau} \quad \text{Eq III-8}$$

Remarquons que pour $s \rightarrow \infty$, $n_s(p_c) \rightarrow 0$ ce qui signifie que nombre d'amas infini est pratiquement nul. Ceci n'est nullement en contradiction avec l'existence du canal infini de percolation puisque la relation EqIII-8 n'est qu'une loi de proportionnalité.

D'une manière générale, la fonction $n_s(\epsilon, s^\sigma) = n(\epsilon, y)$ où $y = s^{-1}$ est asymptotiquement ($\epsilon \rightarrow 0$ et $y \rightarrow 0$) une fonction homogène généralisée. D'après les propriétés des fonctions homogènes généralisées (FHG) il existe deux nombres a_ϵ et a_y tels que pour tout λ positif, et pour tout ϵ et y nous avons l'égalité suivante :

$$n(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_y} y) = \lambda^{a_n} n(\epsilon, y) \quad \text{Eq III-9}$$

où a_n est un coefficient lié à la fonction $n(\epsilon, y)$.

l'une des propriétés des (FHG) concernant la réduction du nombre de variables indépendantes nous permet d'écrire

$$n(\epsilon, y) = y^{\frac{a_n}{a_y}} n \left(\epsilon y^{\frac{-a_\epsilon}{a_y}} \right) \quad \text{Eq III-10}$$

En posant $\frac{a_n}{a_y} = \tau$ et $\frac{a_\epsilon}{a_y} = \sigma$ nous retrouverons la relation (Eq. III-7) :

$$n_s(p) \propto S^{-\tau} \cdot f(\epsilon \cdot S^\sigma) \quad \text{Pour } \epsilon \rightarrow 0 \text{ et } s \rightarrow \infty$$

b) Relations entre les exposants critiques :

Afin d'obtenir des relations entre les exposants $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \sigma$ et τ , nous allons remplacer dans les expressions aux parties singulières des moments $\sum n_s s^k$ ($k=0,1,2$), s par s_ξ et n_s par n_{s_ξ} .

Ce changement est justifié par le biais même de l'hypothèse de changement d'échelles.

Le k -ème moment s'écrira :

$$\left[\sum_s S^K n_s(p) \right]_{\sin g} \rightarrow s_\xi^{k+1} n_{s_\xi}(p) \quad \text{Eq. III-11}$$

Et comme $n_{s_\xi}(p_c) \propto S^{-\tau}$, il vient :

$$S_\xi^{k+1} n_s(p) \propto S_\xi^{k+1-\tau} \quad \text{Eq. III-12}$$

III-12

Et en tenant compte de l'expression de S_ξ , il vient :

$$S_\xi^{k+1-\tau} \propto |p - p_c|^{\frac{\tau-1-k}{\sigma}} \quad \text{Eq. III-13}$$

En faisant $k = (0,1,2)$; et en tenant compte des définitions (eq. II-4) (a, b, c, d, e)

$$k = 0 \quad \left| p - p_c \right|_{\sigma}^{\tau-1} \propto \left| p - p_c \right|^{2-\alpha}$$

et par identification, nous obtenons :

$$\frac{\tau-1}{\sigma} = 2-\alpha \quad \text{Eq. III-14-a}$$

De la même manière pour $k=1$ et $k=2$, nous obtenons :

$$\frac{\tau-2}{\sigma} = \beta \quad \text{Eq. III-14-b}$$

$$\frac{\tau-3}{\sigma} = -\gamma \quad \text{Eq. III-14-c}$$

$$\left[\sum_S n_s S \exp(-h_s) \right]_{\text{sing}} \propto h^{-1} \cdot h^{-1} h^{\tau} \propto h^{\frac{1}{\delta}} \quad \text{ce qui donne}$$

$$\tau-2 = \frac{1}{\delta} \quad \text{Eq. III-14-d}$$

En combinant les relations, nous obtenons :

$$2-\alpha = \gamma + 2\beta = \beta(\delta+1) = d\nu \quad \text{Eq III-15-a}$$

$$\sigma = \frac{1}{\beta\delta} = \frac{1}{\gamma + \beta} \quad \text{Eq III-15-b}$$

$$\tau = 2 + \frac{1}{\delta} \quad \text{Eq III-15-c}$$

La relation $\nu = 2 - \alpha$ sera introduite plus tard lorsque nous aborderons les rayons d'amas $R_s(p)$.

Il est aisé de constater que la théorie de la percolation de Stauffer est une théorie descriptive à caractère purement phénoménologique. En effet comment pourrait-on calculer sept exposants à partir de cinq relations seulement. Faut-il au moins connaître deux de ces exposants pour en déduire les autres. Pour surpasser ce problème, cette théorie a recours aux techniques numériques et grâce auxquelles la connaissance de σ et τ devient plausible.

2 - Nombres d'amas pour $P > P_c$

a) Théorème de Kunz-Souillard

Si on propose une variation de la fonction $n_s(p)$ en fonction d'un coefficient d'atténuation η à travers la relation :

$$\log n_c(p) \propto s^{-\eta} \quad \text{pour } p \text{ fixe et } s \rightarrow \infty \quad \text{Eq III-16}$$

alors l'exposant η obéit à l'inégalité exacte de Kunz-Souillard :

$$\eta \leq 1 - \frac{1}{\alpha} \quad ; \text{ pour } P > P_c \quad \text{Eq III-17-a}$$

$$\eta = 1 \quad ; \text{ pour } P < P_c \quad \text{Eq III-17-b}$$

b) Comportement du nombre d'amas

Cette loi de variation (Eq III-16) fût proposée par Bakri et Stauffer

$\log f(z) \propto -z^{\frac{1}{2\sigma}}$ pour $z > 0,1$ et z non très inférieur à 1, dans quel cas $\eta = 1/2$ pour $d = 2$

Cette relation s'écrit encore :

$$n_s(p) \propto s^{-\tau} \cdot \exp[c^{te} \cdot \sqrt{s}] \quad \text{Eq III-18}$$

et la constante tend vers $(p - p_c)^{\frac{1}{2\sigma}}$ quand $p \rightarrow p_c$

En réalité nous ne savons pas si Stauffer s'était basé sur les données expérimentales pour énoncer sa loi.

Les tests numériques estiment β à 0,14 pour $d=2$ et à 0,4 pour $d = 3$

3 - Nombres d'amas pour $P < P_c$

Il fût remarqué que la fonction $f(z)$ présentait un maximum pour l'argument négatif : $z_{\max} = -(P_c - P_{\max})s$ pour s fixe.

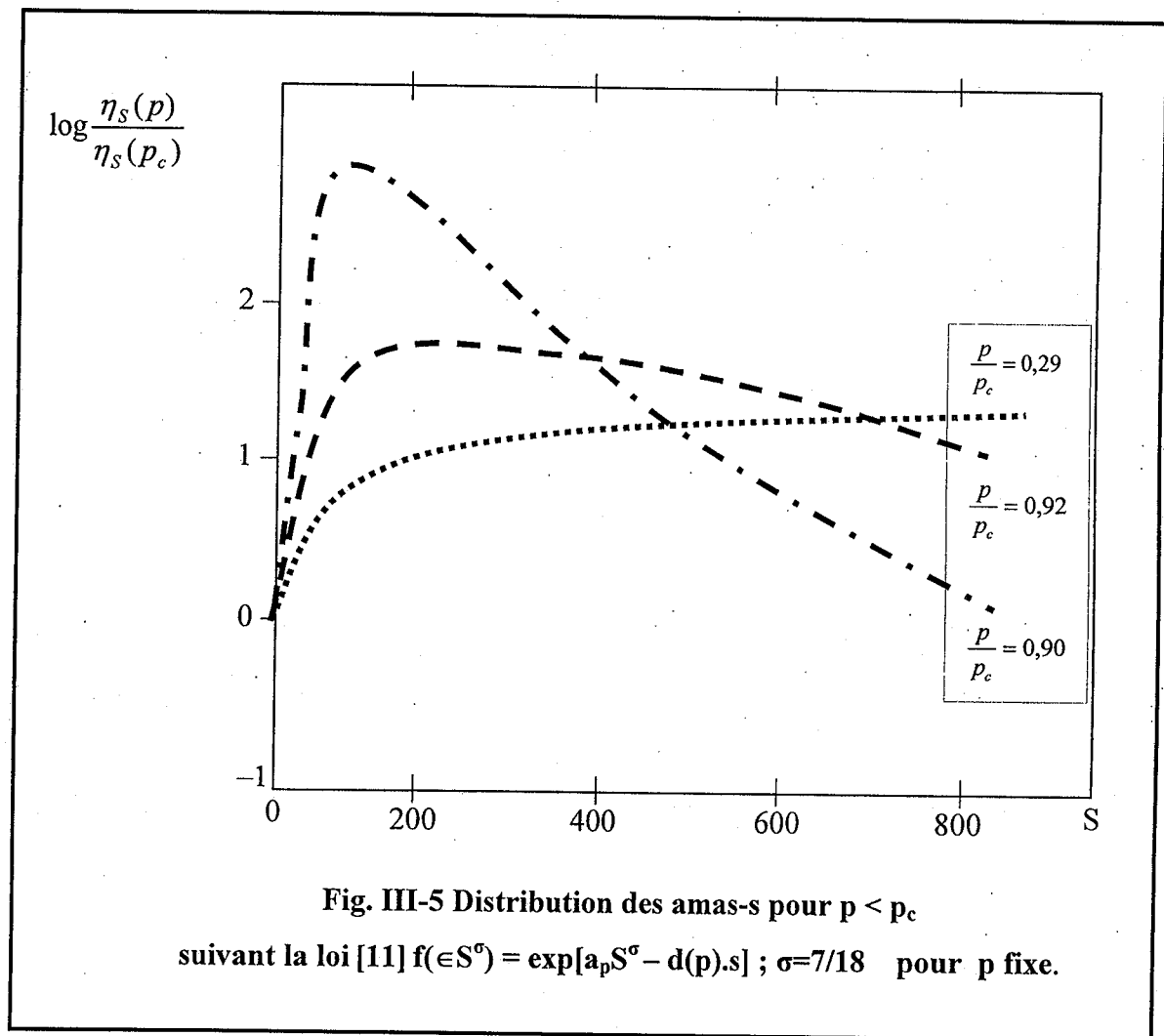
Ce qui revient à dire que la concentration P_{\max} pour laquelle apparaît cet extremum se trouve en dessous de P_c .

On montre, [5] que P_{\max} s'approche de P_c quand s augmente suivant la loi :

$$P_{\max} - P_c \propto -s^\sigma$$

Pour les valeurs grandes de s , la variation du nombre d'amas obéit à la loi :

$$\log f(s) \propto -\left(-z\right)^{\frac{1}{\sigma}} = -(p_c - p)^{\beta\delta} s \propto -s^\eta \quad \text{avec } \eta = 1$$



d'où : $n_s(p) \propto s^{-\tau} \exp(-cte.s)$ Eq. III-19

Une correction, fût apportée, [11], aux nombres d'amas pour des valeurs de s non trop grandes, (fig III-5).

$$n_s(p) = q_0 S^{-\tau} \exp[a(p).s^\sigma - d(p).s] \quad \text{Eq. III-20}$$

où : $\sigma = \frac{7}{18}$ et $a(p) \propto (p - p_c)$; $d(p) \propto (p - p_c) s^{\frac{1}{\sigma}}$

4-Conclusions

Les lois suggérées pour les domaines de concentration $P=P_c$, $P > P_c$ et $P < P_c$ sont des lois en puissances pour $P=P_c$ et en exponentielles pour $P > P_c$ et $P < P_c$. Donc nous remarquons qu'il y a bien asymétrie dans la fonction $f(ES^\sigma)$ relative aux nombres d'amas . Mais nous devons toujours nous rappeler que ces lois sont asymptotiques, donc pour $s \rightarrow \infty$, et qu'elles sont loin d'être testées complètement.

B -RAYONS D'AMAS

Pour donner une forme de variation des rayons moyens d'amas - s , (la moyenne pouvant se faire sur des amas de même dimension s), nous avons besoin d'introduire une hypothèse et un postulat.

L'hypothèse d'hyperchangement d'échelles est de la même nature que celle relative aux nombres d'amas. Elle suppose que la longueur de cohérence (ou le rayon typique des amas - s) définie par :

$$\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}$$

est unique , ou encore c'est elle qui contribue le plus à la description des parties singulières des moments . Autrement dit, les divers définitions attribuées à cette longueur doivent "diverger" avec le même exposant ν ce qui nous permet de passer de la fonction $R_s(p)$ à la fonction de changement d'échelles.

$$\frac{R_s(p)}{\xi(p)} = \tilde{R}\left(P, \frac{S}{S_\xi}\right) \quad \text{Eq III - 21}$$

En addition avec les propriétés de réduction du nombre de variables indépendantes des (F H G) , nous -passons du couple de variables $\left(P, \frac{S}{S_\xi}\right)$ à la variable z , soit :

$$\tilde{R}_S(p) = S_\xi^{\sigma\nu} \tilde{R}_1(\in s^\sigma) \quad \text{EqIII-22}$$

Avec :
$$\varepsilon = \frac{P - P_c}{P_c}$$

Il est clair que la fonction $\tilde{R}_s(p)$ présente la même forme que celle établie pour les nombres moyens d'amas –s elle est aussi déterminée expérimentalement.

Postulat :

Les structures internes des grands amas finis $(\frac{s}{s_\xi} \gg 1 ; z \gg 1)$ sont identiques à celles du canal infini de percolation.

En d'autres termes, si nous observons une portion d'un système d'amas nous ne pourrions distinguer si celle-ci fait partie d'un amas fini ou si elle appartient au canal infini de percolation.

De ce postulat, il découle :

- (i) la densité des sites conducteurs c est la même pour un grand amas que pour le canal infini. Cette densité c représente la probabilité pour qu'un site fasse partie du canal; $c = p \cdot P_\infty$.
- (ii) ce postulat n'est donc valable que pour les concentrations $P > P_c$ où nous pourrions parler d'un canal infini.
- (iii) la contribution essentielle vient des amas grands celle des amas tels que

$$\frac{s}{s_\xi} \ll 1 \quad \text{ou} \quad \frac{s}{s_\xi} \approx 1 \quad \text{est négligeable.}$$

En utilisant la relation classique reliant masse, volume et densité: -
 masse = volume x densité
 nous pourrions écrire

$$S = V_s \cdot P^{P_\infty}$$

EqIII-23

ou v_s et s représentent respectivement le volume et la masse de l'amas.
 Dans les réseaux à d dimensions, nous prenons

$$V_s \propto R_s^d \quad \text{Eq III-24}$$

Compte tenu de la relation (Eq III-23), il vient :

$$S \propto R_s^d \cdot (p - p_c)^\beta$$

ou encore :

$$R_s(P) \propto s^{\frac{+\beta}{d\beta_0}} \cdot (p - p_c)^{\frac{\beta}{d}} \quad \text{EqIII-25}$$

Pour que les deux relations (EqIII-23) et (EqIII-25) soient convenables, par identification s nous devons avoir :

$$d \nu = \beta + \frac{1}{\delta d} = \beta (\delta + 1) \quad \text{EqIII - 26}$$

d'où nous venons de dériver la relation désirée.

Pour $P > P_c$, le rayon s'exprime par :

$$R_s(p_c) \propto s^{\frac{1}{d}} \quad \text{EqIII-27}$$

Pour $P < P_c$ et $P = P_c$, nous entamons la même marche que pour les nombres d'amas en posant :

$$R_S(P) \propto s^5 \quad \text{pour } s \text{ grands} \quad \text{EqIII -28}$$

ou encore :

$$R_s(p) \propto |p - p_c|^{(\beta\delta\zeta - \nu)} \cdot S^\zeta \quad \text{Eq III-29}$$

Les estimations numériques donnent des lois asymptotiques telles que :

$$\zeta (P = P_c) = \frac{\nu}{\beta\delta} = \sigma\nu = \frac{1}{d} \left(1 + \frac{1}{\delta}\right) \text{EqIII} - 30$$

$$\zeta (p < p_c) = \nu_0 \text{EqIII} - 31$$

ν_0 est appelé exposant du rayon moyen des chemins auto-évidants et avait été estimé à 2/3 différent de la valeur 3/4 donnée par [12]

Dans le tableau suivant, nous avons reporté les valeurs de ζ prévues pour les rayons moyens d'amas [11].

d	P < P ₀	P = P ₀	P > P ₀
1	1	1	1
2	0,75	0,53	0,50
3	0,59	0,40	0,33
4	0,50	0,31	0,25
5	0,50	0,27	0,20
6	0,50	0,25	0,17

C- PROFILE DE DENSITE

La densité de sites moyenne dans un amas -s, $D_s(r,p)$, est évaluée uniquement pour $P > P_c$ là où le postulat énoncé précédemment est admis et pour des distances r telles que $r \ll R_s$ (r est la distance séparant un site donné d'une certaine origine prise à l'intérieur de l'amas)

Quand $s \rightarrow \infty$ pour p et r fixes, la densité tend vers la valeur $c = pP^\infty$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} D_s(r, p) = c = pP_{\infty} \quad \text{Eq III-32}$$

La fonction $D_s(r, p)$ dépend de trois variables (r, s, p), et tend pour ($s \rightarrow \infty$ et $p \rightarrow p_c$) vers une fonction (F HG) ce qui nous permet de réduire, ici aussi, le nombre de variables de trois à deux :

$$D_s(r, p) = P_{\infty} \cdot \tilde{D}\left(\frac{r}{\xi}; \frac{s}{S_{\xi}}\right) \quad \text{Eq III-33}$$

soit en introduction l'argument z :

$$D_s(r, p) = P_{\infty} \cdot \tilde{D}_1\left(\frac{r}{S}, z\right) \quad \text{Eq III-34}$$

Si nous choisissons la forme de variation suivante pour $D_s(r, p)$:

$$D_s(r, p) = s^{-X} \cdot \tilde{D}_2(rs^{-\sigma}, (p-p_c)s^{\sigma}) \quad \text{Eq III-35}$$

où :

$$X = \frac{1}{\delta} = d\zeta - 1 \quad \text{Eq III-36}$$

La valeur de x est estimée à $x = 0,054$ pour $p = p_c$ par des considérations sur des réseaux à "bêtes".

Le nombre de sites conducteurs composant un amas sera :

$$s = \int_{\text{amas}} D_s(r, p) dr \quad \text{Eq III-37}$$

Des lois asymptotiques furent suggérées pour cette densité.

$$\log D_s(r) \propto -r \quad \text{pour } P > P_c \quad \text{Eq III-38-a}$$

$$\log D_s(r) \propto -r^{\frac{1}{1-\nu_0}} \quad \text{pour } P < P_c \quad \text{Eq III-38-b}$$

avec $r \gg R_s$ et $s \gg s_\xi$.

Il est à remarquer qu'un test complet de cette fonction n'est pas encore connu.

E - PERIMETRE DAMAS

Vu que la notion de périmètre n'est pas d'une grande importance pour notre étude, nous avons cru bien faire de ne pas s'y attarder. Le périmètre t_s est donné par :

$$t_s = \sum_t t \frac{n_{st}}{n_s} \quad \text{où } t \text{ indique le périmètre, et la sommation se fait sur tous les périmètres des}$$

amas d'une même dimension s ; n_{st} est le nombre d'amas $-s$ dont le périmètre est t et n_s est le nombre total d'amas $-s$.

Si g_{st} représente le nombre des différentes configurations de l'amas $-s$ pour t fixe, alors le nombre moyen d'amas n_s est :

$$n_s = \sum_t n_{st} = \sum_t g_{st} p^s (1-p)^t$$

III.6 - CONCEPT UNIVERSEL - CONSTANTES UNIVERSELLES

III.6.1 - Concept universel :

Nous entendons par concept universel, une classification n'est qu'empirique de différents systèmes de la percolation dans des classes universelle que nous pourrions donner sous formes de tables universelles tout comme les tables logarithmiques et celles des fonctions spéciales.

D'après Stauffer, il semble que les exposants critiques et d'autres propriétés dépendent seulement de la dimension d des réseaux.

Leur dépendance par rapport à la structure des réseaux est moins importante.

Le caractère attribué aux systèmes de la percolation fait en sorte que les fonctions de génération $n_s(p) = n(\epsilon, y)$ présentent une même allure dans tous les réseaux de dimension donnée.

La fonction de génération proposée pour ces systèmes se présente sous la forme générale :

$$n_s(p) = q_0 s^{-\tau} f_u \left[q_1 \cdot (p - p_c) s^\sigma \right] \quad \text{Eq III-39}$$

et $f_u(0) = 1$

où q_0 et q_1 dépendent de la nature des réseaux, et τ étant définis précédemment.

Cette fonction universelle, comme nous l'avons fait remarquer, est encore au stade de recherche. La validité semble se réaliser surtout pour les cas $d = 1$, et $d = 2$ et pour les réseaux de Bethe.

Pour le cas unidimensionnel, cette fonction est donnée par :

$$f(\epsilon S^\sigma) = (\epsilon S^\sigma)^2 \cdot \exp(-\epsilon S^\sigma) \quad \text{Eq III-40}$$

Comme $f(0) = 0$, cette fonction est normalisée par rapport à sa valeur de poids maximal f_{\max} au point $x_{\max} = 2$

Pour le réseau de Bethe cette fonction est donnée par :

$$n_s = \sum_z A(Z) \cdot \exp[-B(Z) \cdot (\epsilon S^\sigma)] \quad \text{Eq III-41}$$

pour $s \gg 1$ et $\epsilon \ll 1$, à savoir que $\lim_{z \rightarrow \infty} B(Z) = \frac{1}{2}$; Z étant le nombre de coordination du réseau ($Z=4$ pour un réseau carré et $Z=6$ pour un réseau triangulaire).

III.6.2 - Constantes universelles :

Parmi les constantes rencontrées $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \sigma, \nu, \tau, \eta$ et ζ nous allons essayer de voir celles qui sont des invariants universelles.

Considérons, tout d'abord, les deux exposants σ et τ dont leurs estimations données par différentes techniques numériques sont rapprochées de la valeur $\tau = 2,02$ et de $\sigma = 0,14$

pour $d = 2$. En effet, nous trouvons $\tau = 2,05 \pm 0,02$ donnée par la théorie de changement d'échelles ;

$\tau = 2,02$ par le développement en séries de puissances

$\tau = 1,97 \pm 0,05$ déduites à partir des techniques numériques de Monte- Carlo .

En espérant que l'étroite divergence due aux estimations de Monte- Carlo est due à ce que ces techniques portaient sur des spécimens finis, nous pourrions dire que τ est une invariante dimensionnelle .

Pour $d=3$; τ est estimée à 2,135 très différente de celle de $d=2$.

Les estimations de σ ne présentent pas de telles divergences

$\sigma = 0,394 \pm 0,03$ par les méthodes de Monte- Carlo

$\sigma = 0,39$ par la théorie de changement d'échelles

$\sigma = 0,39 \pm 0,03$ par le développement en séries de puissances

d'où $\sigma = 0,39$ semble bien une invariante dimensionnelle .

Pour $d = 3$ ces estimations sont moins réussies,

$\sigma = (0,4 - 0,45 - 0,48 - 0,5)$.

Quant à l'exposant β il fût trouvé :

$\beta = 0,133$ par les méthodes de Monte- Carlo et $\beta = 0,139$ par le développement en séries. La

valeur 0,133 avait été difficilement évaluée. Cette valeur étant petite ; il fallait déterminer la probabilité de percolation pP_∞ pour un réseau grand et non pour le canal infini de percolation

nous prenons $\beta = 0,14$ pour $d = 2$ comme une invariante dimensionnelle. pour $d = 3$, β est de l'ordre de 0,4.

La constante δ étant liée directement à τ par la relation $\tau = 1 + \frac{1}{\delta}$ c'est une invariante dimensionnelle. De même pour l'exposant γ elle est liée à σ et β par $\sigma = \frac{1}{\gamma + \beta}$, c'est une

invariante dimensionnelle. Comme $2-\alpha = \beta(\delta+1) = \nu$; les deux exposants α et ν sont des invariante dimensionnelles .

Quant aux exposants η et ζ ils ne pourraient l'être puisque dans une même dimension, ils prennent des valeurs différentes suivant les domaines de concentration de p .

6.3 - Conclusion

Nous tenons toujours à rappeler que ces simulations numériques n'avaient porté que sur des réseaux communs. Plus encore, à $d = 2$, ces résultats ne sont valables que pour les réseaux carré et triangulaire.

IV- Conduction comme percolation

La conduction apparaît fréquemment comme un processus de percolation dans les matériaux inhomogènes, la distribution binaire de conductivité étant la suivante : [5]

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma = 0 \text{ avec la probabilité } 1 - p \\ \sigma = \sigma_0 \text{ avec la probabilité } p \end{array} \right.$$

La probabilité p représente la fraction de volume conducteur associé aux sites ouverts. La théorie de percolation nous informe que pour $P < P_c$; Les régions conductrices du matériau sont disjointes et isolées (figure III-6-a) et la conductivité macroscopique est nulle. Lorsque p dépasse p_c , une fraction finie du matériau (égale à la probabilité de percolation) est connectée en un chemin conduisant à travers l'échantillon (figure III-6-b), et la conductivité en fonction de la fraction de volume conducteur devient une fonction croissante.

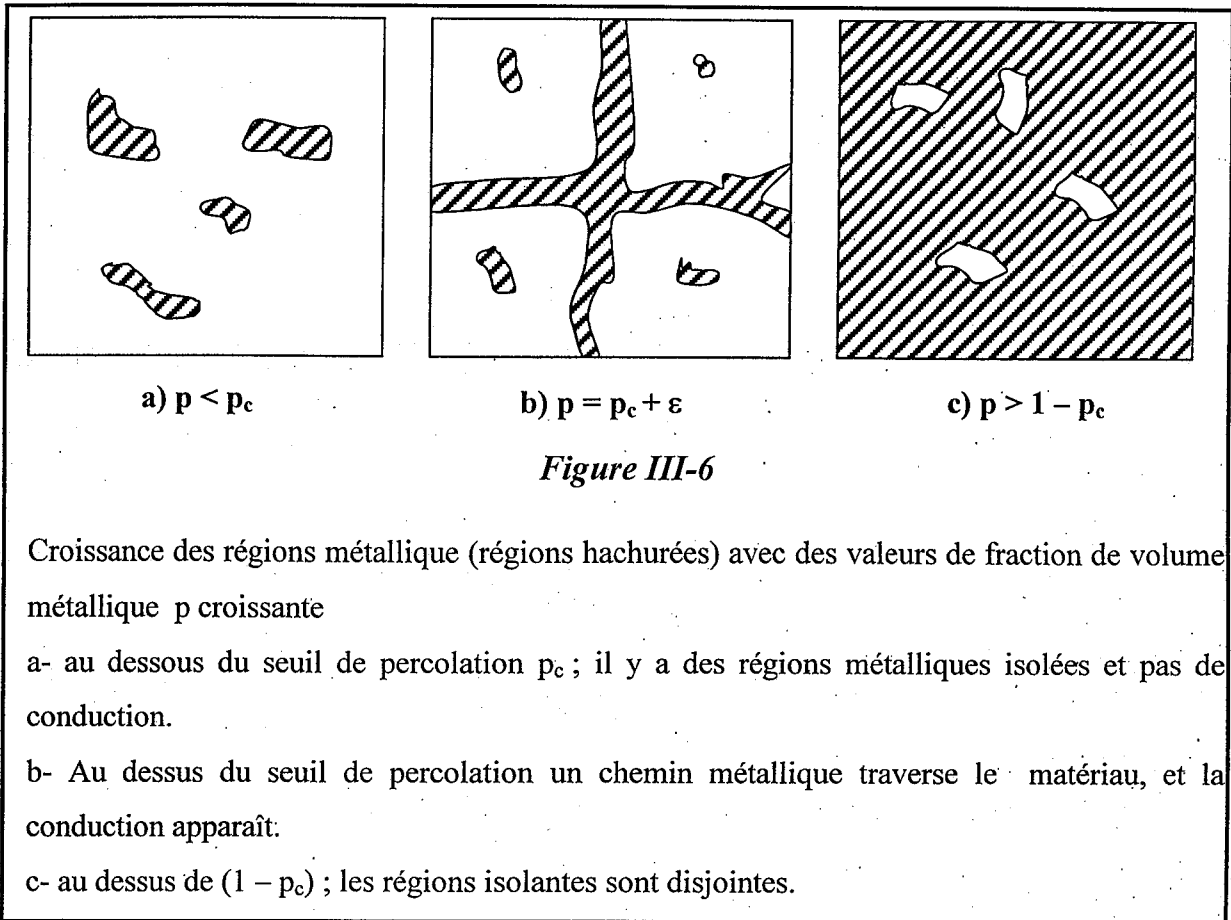
Finalement, quand p dépasse $(1 - p_c)$, les régions isolantes sont disjointes et isolées figure (III-6-c).

Ainsi la transition métal-non métal apparaît au seuil de percolation p_c .

Des rôles généraux de la probabilité de percolation ont été observés et en particulier son apparence au voisinage du seuil de percolation. Cependant la relation, entre la probabilité de percolation $P(p)$ et la conductivité c 'est pas encore claire.

Le seuil de concentration est correctement affirmé par p_c , mais la forme de la fonction conductivité au voisinage de ce seuil ne peut pas être tirée de $P(p)$ seulement ; puisque la probabilité de percolation a une pente infinie au voisinage du seuil de percolation.

Et pour cela on va décrire une autre fonction appelée percolation conductance $G(p)$; qui paraît être utile pour décrire les phénomènes de transport.



V - Modèle de réseau de résistances :

V.1 - Origine de l'association du réseau de résistances aux milieux inhomogènes :

Supposons que l'on connaisse l'arrangement spatial détaillé des régions conductrices et non conductrices dans un système composé. Et supposons que les régions composant le système ont des formes sphériques dans le cas d'un système à 3 dimensions, et des cercles dans le cas d'un système à deux dimensions.

Si la taille des régions conductrices est suffisamment large de façon à ce qu'un courant macroscopique puisse circuler à travers ces dernières régions, une conductivité locale $\sigma(r)$ peut être définie par la valeur de la conductivité du matériau au point r . On peut chercher à calculer la conductivité du système composé et déterminer la valeur vers laquelle cette conductivité peut tendre. Cette valeur est associée à une caractérisation statique distribution de $\sigma(r)$ dans le matériau. Pour $\sigma(r)$ donné; on peut résoudre le problème en écrivant les équations électrostatiques suivantes :

$$\begin{cases} \vec{j}(r) = \sigma(r) \vec{E}(r) \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(r) = 0 \\ \vec{E} = -\vec{\nabla}V \end{cases} \quad \text{EqIII-42}$$

où le potentiel $V(r)$, la densité de courant $\vec{j}(r)$, sont produits en chaque point du système après avoir appliqué une tension à travers l'échantillon.

Les équations présentées en (Eq III-42) peuvent être résolues en introduisant un réseau régulier cubique dont les sites sont espacés d'une distance égale à Δr .

On obtient le système d'équation linéaire suivant pour les potentiels $V_i = V(r_i)$

$$\sum_j g_{ij} (v_j - v_i) = \sum_j I_{ij} = 0 \quad \text{Eq III-43}$$

avec :

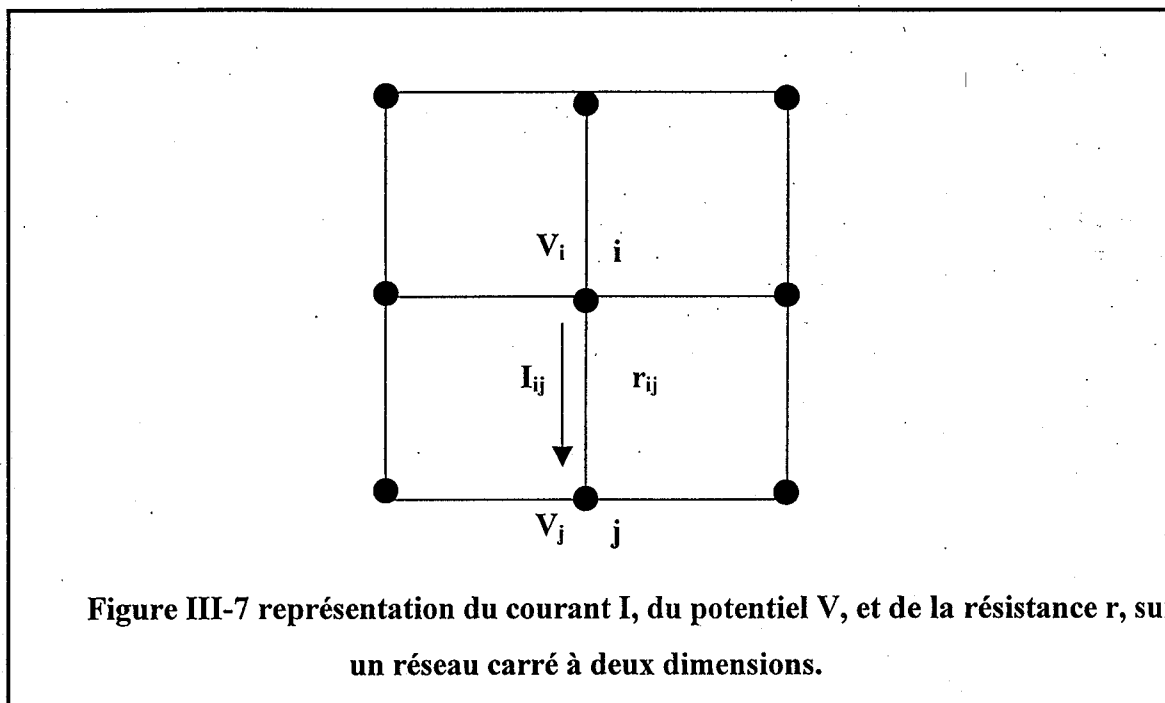
$$g_{ij} = \Delta r \sigma \left(\frac{r_i + r_j}{2} \right) \quad \text{Eq III-44}$$

où I_{ij} est le courant circulant de i à j .

g_{ij} est la conductance entre les points i et j , et la sommation sur j est à travers tous les plus proches voisins de i , la figure III-7 montre une représentation sur un réseau carré à deux dimensions.

L'équation III-43 est valable pour tous points r_i intérieurs à l'échantillon.

Une idéalisation naturelle de réseau pour ce problème est basée sur le fait que l'équation présentée ci-dessus et qui est $\sum_j g_{ij} (V_j - V_i) = 0$ est identique à la loi de Kirchoff pour la conservation de courant pour un réseau régulier constitué de conductances ayant des valeurs g_{ij} , où V_i représente le potentiel au $i^{\text{ème}}$ site.



Dans ce qui suit on va considérer des réseaux de résistances réguliers cubiques avec des valeurs de conductances g_{ij} aléatoires connectant les points adjacents de la maille.

V.2- Modèle de percolation de liaisons appliqué aux réseaux de résistances :

La classe spéciale de modèles de réseaux de résistances dans laquelle g_{ij} peut avoir une des deux valeurs, 0 ou 1, stipule une idéalisation de réseaux naturels pour l'étude des phénomènes de transport présentant des seuils de percolation. La fraction de conductance avec $g_{ij} = 1$ représente la fraction de volume conducteur dans un mélange de phases conductrices et non conductrices.

Naturellement, il y a plusieurs modèles par lesquels nous pouvons attribuer aléatoirement ces deux valeurs aux conductances g_{ij} ; et on va s'intéresser essentiellement au modèle de percolation de liaison qui consiste à choisir aléatoirement une fraction de liaisons et la supprimer du réseau, c'est à dire qu'on attribue à chacune de ces liaisons choisies une conductance $g_{ij} = 0$.

Et puis on associe la valeur unité à chacune des liaisons composants la fraction de liaisons présentés dans le réseau. Toutes les propriétés de transport peuvent être étudiées en fonction de p ; la fraction de liaisons présentes ou conductrices et qui correspond à la fraction du volume conducteur.

V.3 - Deux techniques numériques pour le calcul de $G(p)$ et $P(p)$:

V.3.a - Première technique numérique pour le calcul de $G(p)$:

Après avoir créé le processus stochastique qui consistait à choisir la fraction de liaisons à supprimer du réseau, on cherche maintenant à déterminer la conductance $G(p)$ d'un tel réseau en fonction de la fraction de liaisons conductrices. Et pour cela, commençons par appliquer une certaine tension entre les deux faces de l'échantillon et calculons le courant circulant entre ces deux faces.

La détermination du courant nous permet directement de tirer la conductance $G(p)$.

On résout un système d'équation formé d'équations semblables à celles données par la loi de Kirchoff pour la conservation du courant, ce système comprend n inconnues (n étant le nombre de sites dans le réseau) qui sont les potentiels V_i sur chaque site du réseau.

La détermination des V_i , nous donne éventuellement le courant I_{ij} circulant sur chaque liaison ; et par conséquent on peut en tirer le courant circulant entre les deux faces de l'échantillon.

Les points expérimentaux représentés sur la figure (III-8) représentent la conductance $G(p)$, obtenue par Kirkpatrick [8], d'après des études numériques pour des réseaux à trois dimensions par le modèle de percolation de liaisons. Cette conductance est exprimée en fonction de p , la fraction de liaisons conductrices. On remarque que $G(p)$ est normalisée à l'unité pour $p = 1$ de sorte que $G(1) = 1$.

V.3.b - Deuxième technique numérique pour le calcul de $P(p)$:

Par comparaison, on a aussi représenté sur la même figure des résultats obtenus par Frish, Hammersley, et Welsh ; sur les mêmes réseaux, pour la probabilité percolation de liaison $P(p)$.

Ces derniers ont utilisé une technique numérique qui possède des moyens expérimentaux pour le dénombrement des amas en théorie de la percolation. Cette technique consiste à créer le processus stochastique, et, aussi à évaluer les propriétés structurales des amas.

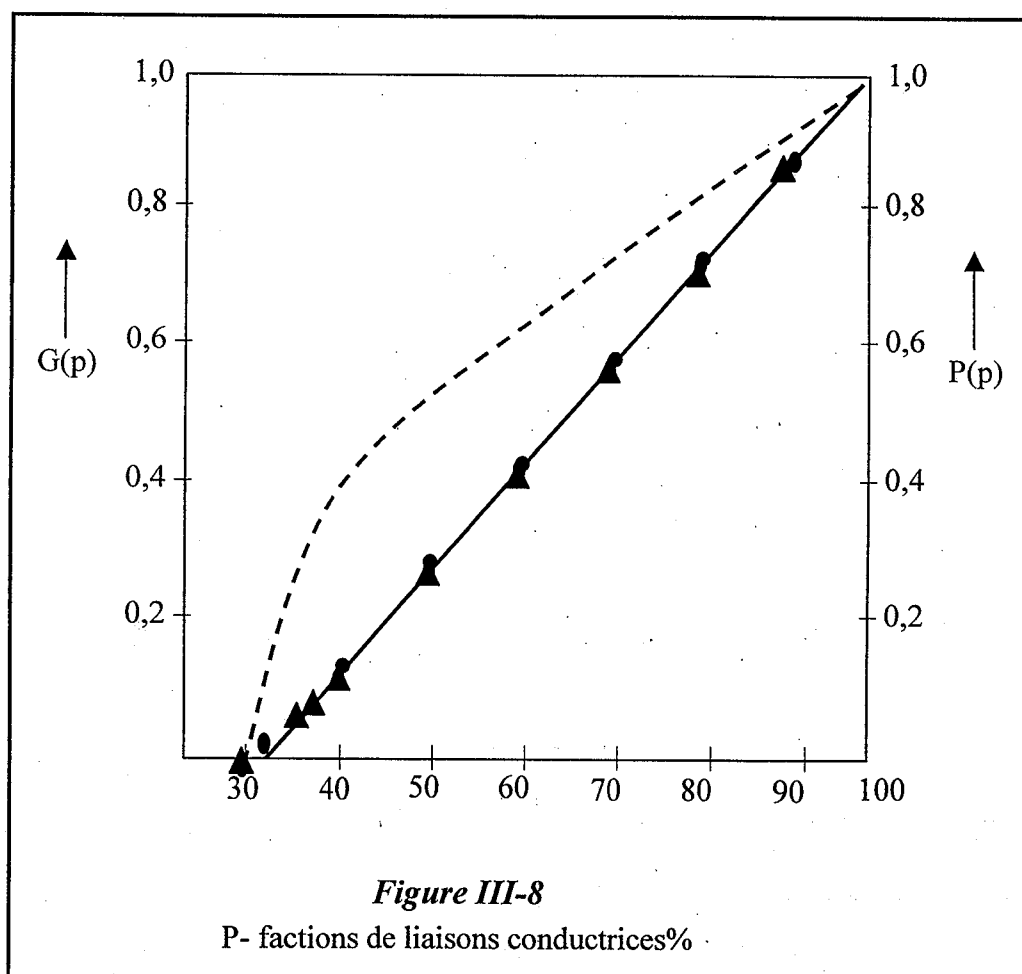
V.3.c - Discussion sur les deux dernières techniques numériques :

Ces deux dernières techniques numériques ne sont pas faciles, mais néanmoins elles sont abordables.

Donc les deux fonctions : percolation de conductance $G(p)$ et probabilité de percolation $P(p)$ sont représentées sur une même figure, ces deux fonctions ont la même concentration critique avec une incertitude inférieure à 0,01, mais ces deux fonctions sont différentes au delà de ce point critique

On remarque aussi que $P(p)$ a une pente infinie au voisinage du seuil de percolation, tandis que $G(p)$ a une pente nulle au voisinage de ce seuil.

Donc on peut dire que la probabilité de percolation est insuffisante pour décrire les phénomènes de transport au-delà du seuil de percolation ; et que cette dernière nous aide seulement à trouver la concentration critique de percolation à partir de laquelle la conductance va croître de zéro jusqu'à une valeur limite



$G(p)$ { en trait plein (théorie du milieu effectif)
Points expérimentaux (d'après la référence [9] ; cercles pour un réseau à (15x15x15) sites.
Triangles pour un réseau à (25x25x25) sites
 $P(p)$ courbe en pointillés

Deux domaines de percolation apparaissent sur la figure III-8.

- Une région critique dans laquelle la conductance $G(p)$ croît de zéro avec une pente presque nulle,
- Le régime de grande concentration dans lequel la conductance croît uniformément jusqu'à atteindre la valeur unité.

Les simulations numériques [12] ;[13] ;[15] ;[16];[17] nous donnent la forme de la courbe $G(p)$ représentée sur la figure (III-8), et qui peut s'écrire analytiquement comme suit :

$$\begin{cases} G(p) \propto (p - p_c)^s & \text{pour } P > P_c \\ G(p) = 0 & \text{pour } P < P_c \end{cases} \quad \text{Eq III-45}$$

la table 1 nous donne les seuils de percolation p_c ; les exposants critiques s pour différents cas étudiés.

Les deux premières lignes de la table sont obtenues à partir de la première technique numérique ; tandis que les deux dernières lignes sont obtenues à partir de l'application de la théorie du milieu effectif.

La conductance du système trouvée par la théorie du milieu effectif est représentée sur la figure III-8 par une ligne droite et qui donne une prédiction très exacte de la conductance dans le régime de grandes concentrations.

A partir de la discussion faite sur la figure III-8 on peut dire qu'à l'extérieur du régime critique, la conductance $G(p)$ est décrite par un calcul analytique exacte utilisant la théorie du milieu effectif.

Table 1 :

	P_c	S
Système à 3 dimensions Percolation de liaisons	0,25	$1,6 \pm 0,1$
Système à 2 dimensions Percolation de liaisons	$0,48 \pm 0,02$	$1,1 \pm 0,1$
Système à 3 dimensions Théorie du milieu effectif	0,33	1
Système à 2 dimensions Théorie du milieu effectif	0,5	1

VI - Théorie du milieu effectif

L'approximation utilisée est celle du milieu effectif qui a été déjà traitée dans la deuxième partie de notre travail pour un cas général de système ; elle va être discutée en détail dans la suite de notre étude pour l'évaluation de la conductance pour les systèmes, présentant des phases sous formes sphériques dans le cas d'un problème à trois dimensions ; et des cercles dans le cas d'un problème à deux dimensions,

En regardant la table1, nous remarquons que dans le cas d'un système à deux dimensions, la conductance trouvée par la théorie du milieu effectif coïncide exactement avec la conductance $G(p)$ trouvée à partir de la technique numérique.

Dans ce qui suit nous allons présenter la théorie du milieu effectif et puis l'appliquer à la classe spéciale de modèles de réseaux de résistances dans laquelle g_{ij} peut avoir une des deux valeurs, 0 ou 1, et qui stipule une idéalisation de réseaux naturels pour l'étude des phénomènes de transport présentant des seuils de percolation.

VII - Application de la théorie du milieu effectif aux réseaux de résistances

variables :

Considérons un système constitué de deux phases homogènes, dont la première phase correspond à une conductivité σ_1 et une fraction de volume p_1 et la deuxième phase correspond à une conductivité σ_2 et une fraction de volume p_2 .

Supposons aussi que ces régions ont des formes sphériques dans le cas d'un système à trois dimensions, et cercles dans le cas d'un système à deux dimensions.

Le paragraphe (V - 1) nous permet d'associer à ce milieu à deux phases un réseau cubique constitué de conductances g_{ij} connectant les points adjacents de la maille.

La distribution du potentiel dans un réseau de résistances variables pour lequel un champ extérieur faible est appliqué selon un certain axe peut-être vue comme étant dûe à deux facteurs.

- Le premier facteur est un champ homogène.
- Le deuxième facteur est une fluctuation ou " champ local " qui varie d'un point à l'autre dans le système considéré.

On va justement essayer de représenter les effets moyens du réseau de résistances variables par un milieu effectif dans lequel la valeur moyenne du champ local à travers une certaine région est nulle, donc ce milieu effectif est défini comme étant un milieu dans lequel le champ est partout constant et égal au champ homogène, un tel milieu est dit homogène.

Donc l'effet des conductances aléatoires sera représenté par un milieu effectif homogène constitué de conductances g_m connectant les sites voisins dans un réseau régulier cubique, et pour lequel nous allons appliquer le critère suivant :

" Fixons g_m , on doit poser que la valeur moyenne du potentiel supplémentaire induit lorsque des conductances g_{ij} remplacent g_m dans le milieu effectif, c'est-à-dire le champ local, tend vers zéro .

VIII - Approximation à une seule liaison

VIII.a - Cas général

Dans le cas de l'approximation du milieu effectif (AME) à une seule liaison, nous allons appliquer le critère énoncé ci-dessus à une seule liaison du réseau : Prenons un réseau régulier avec un nombre de coordination z , ce réseau est constitué d'un milieu effectif homogène formé de conductances g_m connectant les sites voisins dans un réseau régulier, et puis nous remplaçons une conductance g_m entre A et B par g' (voir figure III-9) ayant la valeur g_1 avec la probabilité p_1 , et la valeur g_2 avec la probabilité p_2 .

$$\text{C'est-à-dire que } g' = \begin{cases} g_1 & P(g') = p_1 \\ g_2 & P(g') = p_2 \end{cases}$$

La probabilité de distribution de g' est $P(g')$ égale à l'expression suivante :

$$P(g') = p_2 \delta(g - g_2) + p_1 \delta(g - g_1) \quad \text{Eq. III-45}$$

Notons que physiquement P_1 et P_2 représentent les fractions de volume des phases 1 et 2.

Un courant i_m et un potentiel V_m sont associés à chaque liaison dans le milieu effectif uniforme avec :

$$g_m V_m = i_m \quad \text{Eq III-46}$$

Si la conductance g' est introduite dans le milieu effectif, nous allons donc apporter à notre système une certaine fluctuation, et il y aura donc apparition d'un courant fictif i' , et d'un potentiel supplémentaire V' , le courant à travers g' est alors $i' + i_m$ et le potentiel $V' + V_m$ tel que :

$$g'(v'+v_m) = i'+i_m$$

Eq III-47

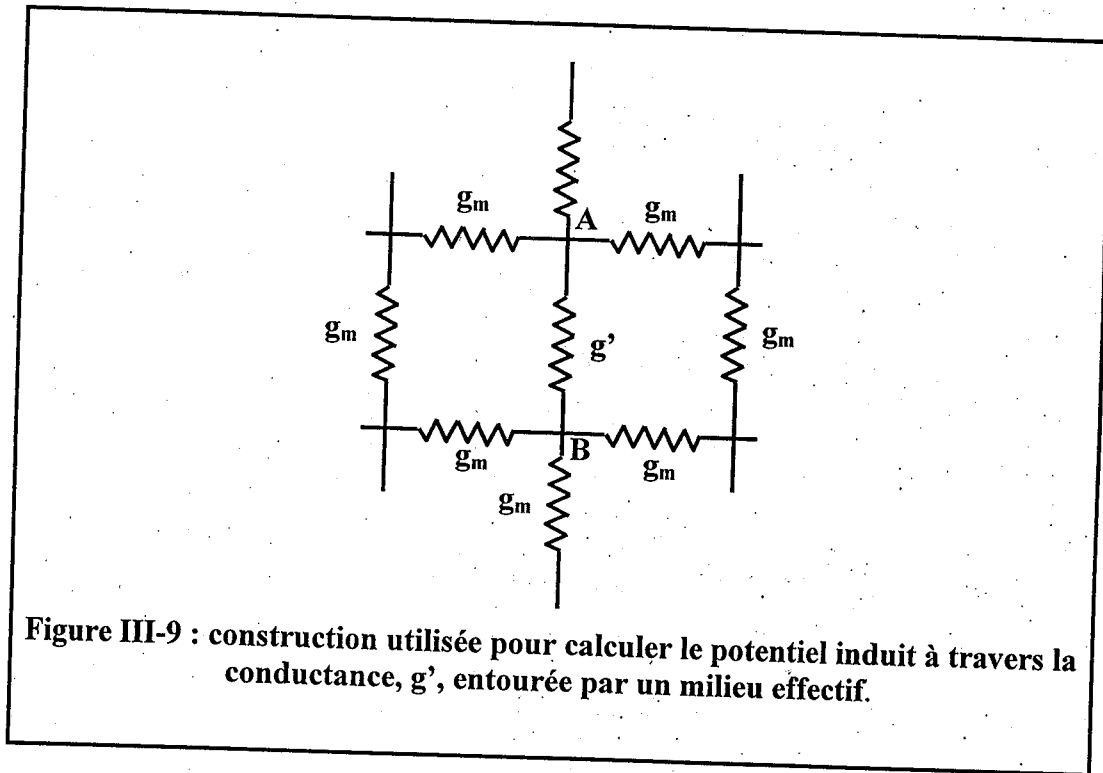


Figure III-9 : construction utilisée pour calculer le potentiel induit à travers la conductance, g' , entourée par un milieu effectif.

Dans le milieu effectif homogène, la conductance g_m entre A et B a été remplacée par g' , donc nous avons effectué une certaine modification à notre conductance initiale, et le changement de courant i' dans toutes les autres branches (d'après le théorème de compensation utilisé en électronique) serait celui produit par un potentiel égal à $(-v')$ donc

$$G'_{AB} V' = -i'$$

Eq III-48

Où G'_{AB} voir figure (III-10) représente la conductance équivalente de toutes les branches allant de A vers B exceptée la branche AB.

En utilisant les équations (III-46-47-48), nous calculons le potentiel de fluctuation V' en fonction de V_m, g_m, g', G'_{AB} .

Donc l'effet des conductances aléatoires sera représenté par un milieu effectif homogène constitué de conductances g_m connectant les sites voisins dans un réseau régulier cubique, et pour lequel nous allons appliquer le critère suivant :

" Fixons g_m , on doit poser que la valeur moyenne du potentiel supplémentaire induit lorsque des conductances g_{ij} remplacent g_m dans le milieu effectif, c'est-à-dire le champ local, tend vers zéro .

VIII - Approximation à une seule liaison

VIII.a - Cas général

Dans le cas de l'approximation du milieu effectif (AME) à une seule liaison, nous allons appliquer le critère énoncé ci-dessus à une seule liaison du réseau : Prenons un réseau régulier avec un nombre de coordination z , ce réseau est constitué d'un milieu effectif homogène formé de conductances g_m connectant les sites voisins dans un réseau régulier, et puis nous remplaçons une conductance g_m entre A et B par g' (voir figure III-9) ayant la valeur g_1 avec la probabilité p_1 , et la valeur g_2 avec la probabilité p_2 .

$$\text{C'est-à-dire que } g' = \begin{cases} g_1 & P(g') = p_1 \\ g_2 & P(g') = p_2 \end{cases}$$

La probabilité de distribution de g' est $P(g')$ égale à l'expression suivante :

$$P(g') = p_2 \delta (g - g_2) + p_1 \delta (g - g_1) \quad \text{Eq. III-45}$$

Notons que physiquement P_1 et P_2 représentent les fractions de volume des phases 1 et 2.

Un courant i_m et un potentiel V_m sont associés à chaque liaison dans le milieu effectif uniforme avec :

$$g_m V_m = i_m \quad \text{Eq III-46}$$

Si la conductance g' est introduite dans le milieu effectif, nous allons donc apporter à notre système une certaine fluctuation, et il y aura donc apparition d'un courant fictif i' , et d'un potentiel supplémentaire V' , le courant à travers g' est alors $i' + i_m$ et le potentiel $V' + V_m$ tel que :

$$g'(v' + v_m) = i' + i_m \quad \text{Eq III-47}$$

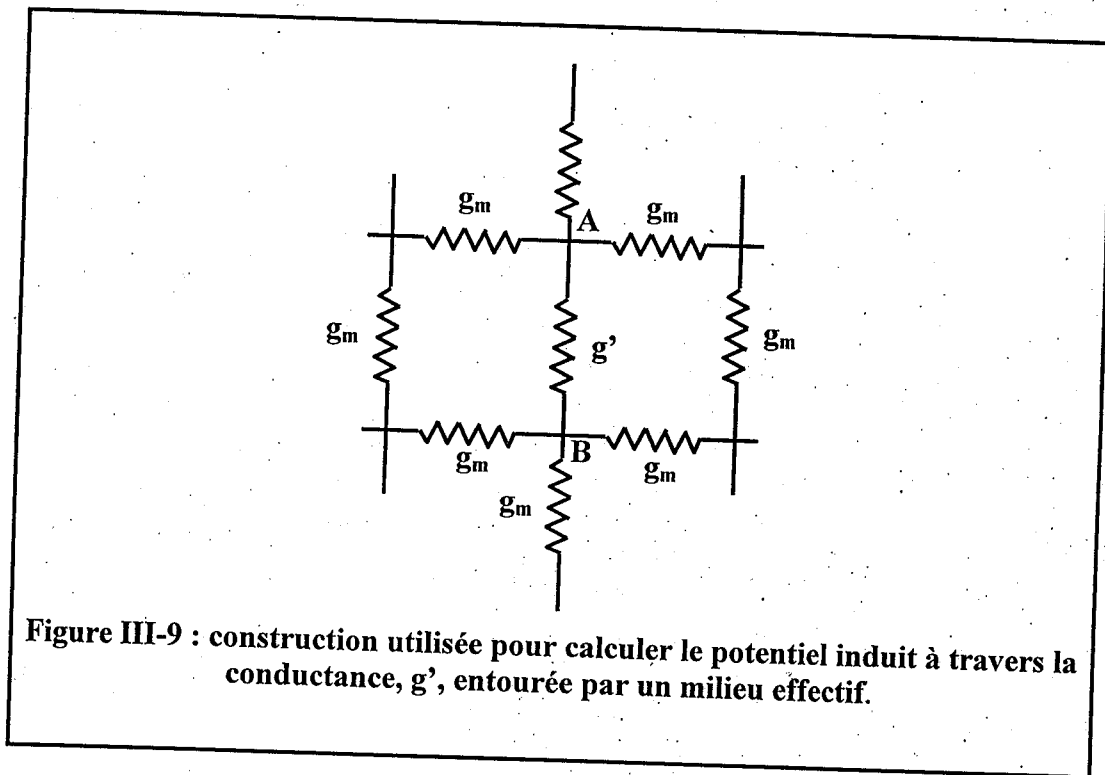


Figure III-9 : construction utilisée pour calculer le potentiel induit à travers la conductance, g' , entourée par un milieu effectif.

Dans le milieu effectif homogène, la conductance g_m entre A' et B a été remplacée par g' , donc nous avons effectué une certaine modification à notre conductance initiale, et le changement de courant i' dans toutes les autres branches (d'après le théorème de compensation utilisé en électronique) serait celui produit par un potentiel égal à $(-v')$ donc

$$G'_{AB} V' = -i' \quad \text{Eq III-48}$$

Où G'_{AB} voir figure (III-10) représente la conductance équivalente de toutes les branches allant de A vers B exceptée la branche AB.

En utilisant les équations (III-46-47-48), nous calculons le potentiel de fluctuation V' en fonction de V_m, g_m, g', G'_{AB} .

$$V' = -\frac{i'}{G'_{AB}} = \frac{i_m - g'(V' + V_m)}{G'_{AB}} = \frac{g_m V_m - g'(V' + V_m)}{G'_{AB}}$$

D'où finalement :

$$V' = V_m \frac{g_m - g'}{G'_{AB} + g'} \quad \text{Eq III-49}$$

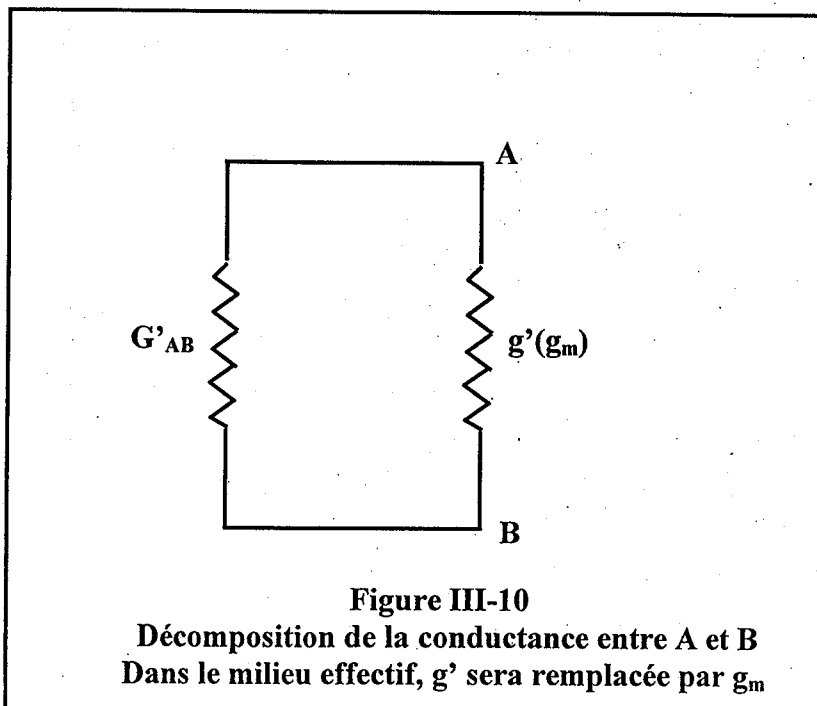
La conductance g_m est choisie de telle manière que la moyenne du potentiel de fluctuation V' prise sur la distribution exposée en Eq III-45 est égal à zéro, c'est-à-dire $\langle V' \rangle = 0$

Mais avant de passer à cette moyenne, nous devons calculer G'_{AB} ; pour le faire, nous utilisons le fait que dans le milieu effectif la conductance G_{AB} entre les deux extrémités de la liaison AB figure (III-10) est donnée par :

$$G_{AB} = G'_{AB} + g_m \quad \text{Eq III-50}$$

Commençons par calculer la conductance G_{AB} en fonction de g_m , et nous pouvons alors en déduire G'_{AB} en fonction de g_m .

La conductance G_{AB} entre les points A et B est obtenue par la méthode de superposition suivante en écrivant qu'un courant de distribution qui entre en A et sort en B est la somme de deux contributions exprimée comme suit :



- (a) Un courant i introduit en A et extrait dans toutes les directions (figure III-11-a)
 (b) Un autre courant égal, introduit dans toutes les directions et extrait en B (figure III-11-b)

Dans chaque cas, un courant égal à $\frac{i}{z}$ circule à travers chacune des z liaisons équivalentes.

D'où par superposition des deux cas, on arrive à la conclusion que le courant circulant à travers la liaison AB est égal à $\frac{2i}{z}$ figure III-11-c

Tandis que la différence de potentiel v entre A et B est donnée par :

$$\begin{cases} g_m V = \frac{2i}{z} \\ G_{AB} V = i \end{cases} \quad \text{Eq. III-51}$$

Eq. III-52

Nous tirons l'expression donnant i à partir de l'équation Eq III-51 et nous la remplaçons dans Eq III-52 nous trouvons :

$$G_{AB} V = g_m V \frac{z}{2} \Rightarrow G_{AB} = g_m \frac{z}{2} \quad \text{Eq III-53}$$

Nous en déduisons alors l'expression donnant G'_{AB} en fonction de g_m :

$$G'_{AB} = g_m \frac{z}{2} - g_m = g_m \left(\frac{z}{2} - 1 \right) \quad \text{Eq III-54}$$

En remplaçant G'_{AB} par l'expression qui vient d'être trouvée dans Eq.III-49 nous trouvons

$$V' = V_m \frac{g_m - g'}{g_m \left(\frac{z}{2} - 1 \right) + g'} \quad \text{Eq III-55}$$

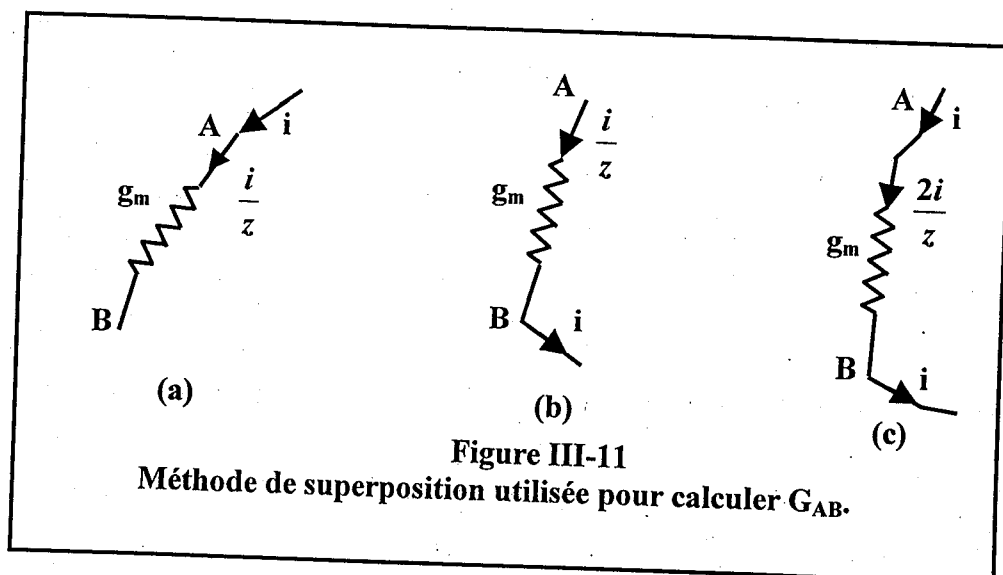
Si la valeur de la conductance associée à la liaison AB est distribuée selon la probabilité $P(g')$ la condition pour que la valeur moyenne du potentiel de fluctuation V' s'annule nous permet de déterminer g_m :

$$\int dg' P(g') \cdot \frac{g_m - g'}{g' + \left(\frac{z}{2} - 1\right) g_m} = 0 \quad \text{Eq III-56}$$

En insérant la probabilité présentée en Eq.III-45 dans la condition écrite ci-dessus, nous aboutissons à l'équation du second degré en g_m suivante :

$$p_2 \frac{g_m - g_2}{g_2 + \left(\frac{z}{2} - 1\right) g_m} + p_1 \frac{g_m - g_1}{g_1 + \left(\frac{z}{2} - 1\right) g_m} = 0$$

$$\Rightarrow g_m^2 (z - 2) + g_m [g_1 (2 - zp_1) + g_2 (2 - zp_2)] - 2g_1 g_2 = 0$$



Ce qui donne la solution suivante pour g_m , conductance du milieu effectif.

$$g_m = \frac{1}{z-2} \left\{ \left[\frac{1}{2} z P_1 - 1 \right] g_1 + \left[\frac{1}{2} z P_2 - 1 \right] g_2 \right\} + \frac{1}{z-2} \left\{ \left(\frac{1}{2} z P_1 - 1 \right) g_1 + \left(\frac{1}{2} z P_2 - 1 \right) g_2 \right\}^2 + 2(z-2) g_1 g_2 \left. \right\}^{1/2}$$

EqIII-57

VIII.b - Application aux systèmes présentant des seuils de percolation :

Appliquons maintenant ce dernier résultat (formule Eq III-57) à la classe spéciale de modèles de réseaux dans laquelle g' peut prendre une des deux valeurs, 0 ou 1, et qui stipule une idéalisation de réseaux naturels pour l'étude des phénomènes de transport présentant des seuils de percolation.

$$\text{Donc } g' = \begin{cases} 1 & P(g') = p \\ 0 & P(g') = 1-p \end{cases}$$

Ceci nous donne :

$$g_m(p) = \begin{cases} \frac{pz - 2}{z - 2} & p > \frac{2}{z} \\ 0 & p < \frac{2}{z} \end{cases} \quad \text{EqIII-58}$$

$P_c = \frac{2}{z}$ représente la probabilité critique pour laquelle un état conducteur apparaît dans le milieu effectif.

Deux cas sont à considérer :

1° cas: Système à 3 dimensions ($z=6$)

$$g_m(P) = \begin{cases} \frac{3}{2} \left(P - \frac{1}{3} \right) & P > \frac{1}{3} \\ 0 & P < \frac{1}{3} \end{cases} \quad \text{Eq III-59}$$

Les résultats numériques représentés sur la figure III-8 par des points expérimentaux, et sur la table 1 ; dans le cas d'un système à trois dimensions montrent que la théorie du milieu effectif nous donne une description très exacte des phénomènes de transport dans les deux domaines suivants : $p > 40\%$ et $p < 25\%$

Donc dans ces deux domaines; la conductance du milieu peut être directement donnée à partir de celle étudiée dans la théorie du milieu effectif comme suit :

$$\begin{cases} G(p) = g_m(p) = \frac{3}{2} \left(p - \frac{1}{3} \right) & \text{pour } p > 40\% \\ G(p) = g_m(p) = 0 & \text{pour } p < 25\% \end{cases} \quad \text{EqIII-60}$$

Tandis que dans le domaine $25\% < p < 40\%$ la théorie du milieu effectif nous donne une description approximative des phénomènes de transport dans le milieu.

2° cas : Système à deux dimensions ($z = 4$)

$$g_m(p) = \begin{cases} 2 \left(p - \frac{1}{2} \right) & \text{pour } p > \frac{1}{2} \\ 0 & \text{pour } p < \frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{EqIII-61}$$

Les résultats numériques donnés par la table 1, dans le cas d'un système à deux dimensions, montrent que la théorie du milieu effectif nous donne une description exacte des phénomènes de transport dans tout le domaine $0 < p < 100\%$

Et on peut alors en déduire directement la conductance du milieu à partir de celle trouvée par la théorie du milieu effectif comme suit :

$$\begin{cases} G(p) = g_m(p) = 2\left(p - \frac{1}{2}\right) & \text{pour } p > \frac{1}{2} \\ G(p) = g_m(p) = 0 & \text{pour } p < \frac{1}{2} \end{cases} \quad \text{Eq III-62}$$

IX- Détermination de la conductivité effective dans le cas d'un système présentant un seuil de percolation :

Nous allons nous intéresser aux conductivités; donc prendre la formule générale (III-1) dans le cas d'un système très générale composé de deux phases, et l'appliquer aux cas particulier de matériaux inhomogènes ayant la distribution binaire suivante :

$\sigma = 0$ avec la probabilité $1 - p$

$\sigma = \sigma_1$ avec la probabilité p

La probabilité p représente la fraction de volume conducteur.

La conductivité effective est obtenue dans ce cas là, à partir de celle trouvée dans le cas général, et en utilisant les transformations suivantes :

$$\sigma_1 \longrightarrow \sigma_1$$

$$\sigma_2 \longrightarrow 0$$

$$p_1 \longrightarrow p$$

$$p_2 \longrightarrow 1-p$$

Nous obtenons directement le résultat suivant :

$$\begin{cases} \sigma_m(P) = \sigma_1 \left(\frac{3}{2}P - \frac{1}{2} \right) & \text{pour } P > \frac{1}{3} \\ \sigma_m(P) = 0 & \text{pour } P < \frac{1}{3} \end{cases} \quad \text{Eq.III-63}$$

L'équation (III-63) représente la conductivité effective à faible champ électrique associée aux matériaux composés de métal et d'isolant ; ces matériaux sont connus sous le nom de matériaux granulaires ou cermets,

Ces métaux granulaires sont préparés à partir de différentes méthodes, par exemple :

- L'évaporation d'un métal oxydable en présence d'oxygène.
- La co-évaporation des mélanges métal -isolant non miscibles.
- L'implantation d'ions métalliques sur un isolant.

L'étude de la conductivité effective nous permet de prévoir une bonne description des phénomènes de transport se déroulant à l'intérieur du métal granulaire ayant des particules métalliques sous formes sphériques.

Chapitre IV

Conduction par saut dans les
systèmes désordonnés

I- Notions de base sur les systèmes désordonnés :

Modèles et mécanismes de conductions

I.1 - Etat cristallin état non cristallin (ou désordonné) :

Le corps solide peut présenter deux états de structures et de propriétés plus ou moins différentes; ces deux états correspondent soit à l'état cristallin soit à l'état désordonné.

Dans l'état cristallin il existe une structure de base bien définie qui est le réseau cristallin. Il n'est en fait qu'une description idéalisée d'un arrangement spatial d'atomes fondé sur l'hypothèse de base suivante : cet arrangement est strictement périodique dans l'espace. Cette description ne tient pas compte des défauts, des impuretés des vibrations thermiques et des limitations spatiales qui sont toujours présents dans les cristaux réels.

Les expériences de diffraction, par faisceaux de rayon X, d'électrons ou de neutrons, effectuées sur les cristaux permettent la mise en évidence de cette périodicité dans l'arrangement des atomes et donnent des informations importantes sur l'ordre à grande distance. Ces mêmes expériences confirment l'absence de périodicité dans l'arrangement des atomes pour toute modification de la structure idéale.

L'état désordonné, par contre et d'une façon globale, est dépourvu de structure régulière : la répartition des atomes est, d'une façon générale, aléatoire. Selon l'importance de la modification subie par la structure idéale du cristal, le système présentera alors un certain degré de désordre : faiblement, partiellement ou complètement désordonné. Cette notion de système désordonné n'est pas propre au solide dépourvu de structure régulière; en effet elle englobe également les liquides qui sont considérés comme des systèmes fortement désordonnés.

Dans la catégorie des systèmes désordonnés sont classés les corps amorphes et les métaux granulaires.

Les corps amorphes présentent certaines analogies avec les cristaux vers lesquels ils évoluent, en effet la phase amorphe est définie comme étant une phase dans laquelle l'ordre à courte distance est conservé, alors que l'ordre à grande distance est complètement inexistant. L'ordre à courte distance s'étend sur une longueur de quelques dizaines d'Angstrom seulement.

Les métaux granulaires sont des corps composés de deux phases: une phase métallique et une phase isolante. A l'intérieur d'une matrice isolante sont pulvérisés des grains métalliques répartis aléatoirement. Mais il est à noter qu'à l'intérieur de chaque phase l'ordre est complètement conservé.

La périodicité du réseau cristallin parfait a pour conséquences les propriétés suivantes : nature étendue des états énergétiques (c'est-à-dire que les électrons sont libres de se mouvoir), bords de bande bien définis.

La disparition de la périodicité va donc entraîner pour le système désordonné: une modification de ces mêmes propriétés. Comme les systèmes désordonnés peuvent être de divers types plusieurs modèles ont été alors proposés, selon les cas, pour permettre l'étude du comportement des électrons à l'intérieur de ces structures.

1.2 - Modèles de base des systèmes non cristallins :

Vu la diversité des types de désordre possible, il y a eu des classifications qui ont été proposées afin de les distinguer. Ces classifications ne se distinguent que par la terminologie et le degré de désordre. D'une façon générale deux grandes classes de systèmes désordonnés dans l'espace ont été étudiées:

Le désordre cellulaire: Les potentiels ou centres atomiques sont distribués sur un réseau périodique et sont différents d'un site à l'autre. Ce type de désordre est également appelé désordre substitutionnel ou de composition.

Le désordre structural: Ce type de désordre est caractérisé par l'absence de réseau de base régulier; il n'y a donc point de régularité dans l'arrangement des centres. Il est aussi appelé désordre topologique ou de position.

A l'intérieur de ces deux grandes classes, il y a plusieurs variantes dont il faut citer quelques unes.

1.2.1 - Modèle de la répartition aléatoire en position des centres :

Dans ce modèle, le désordre est caractérisé par une répartition aléatoire en position des puits de potentiel, de profondeur identique. Les distances séparant les différents centres se répartissent selon une certaine loi de distribution ...

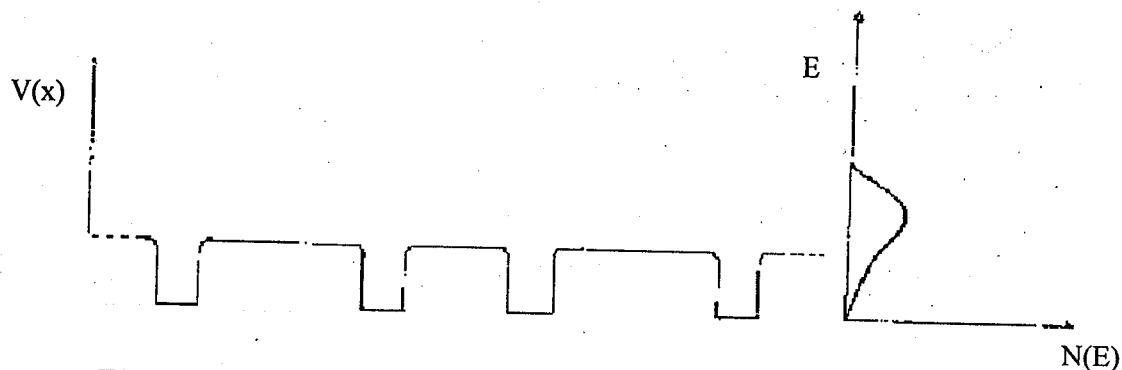


Fig IV-1. Modèle de la répartition aléatoire en position des centres.

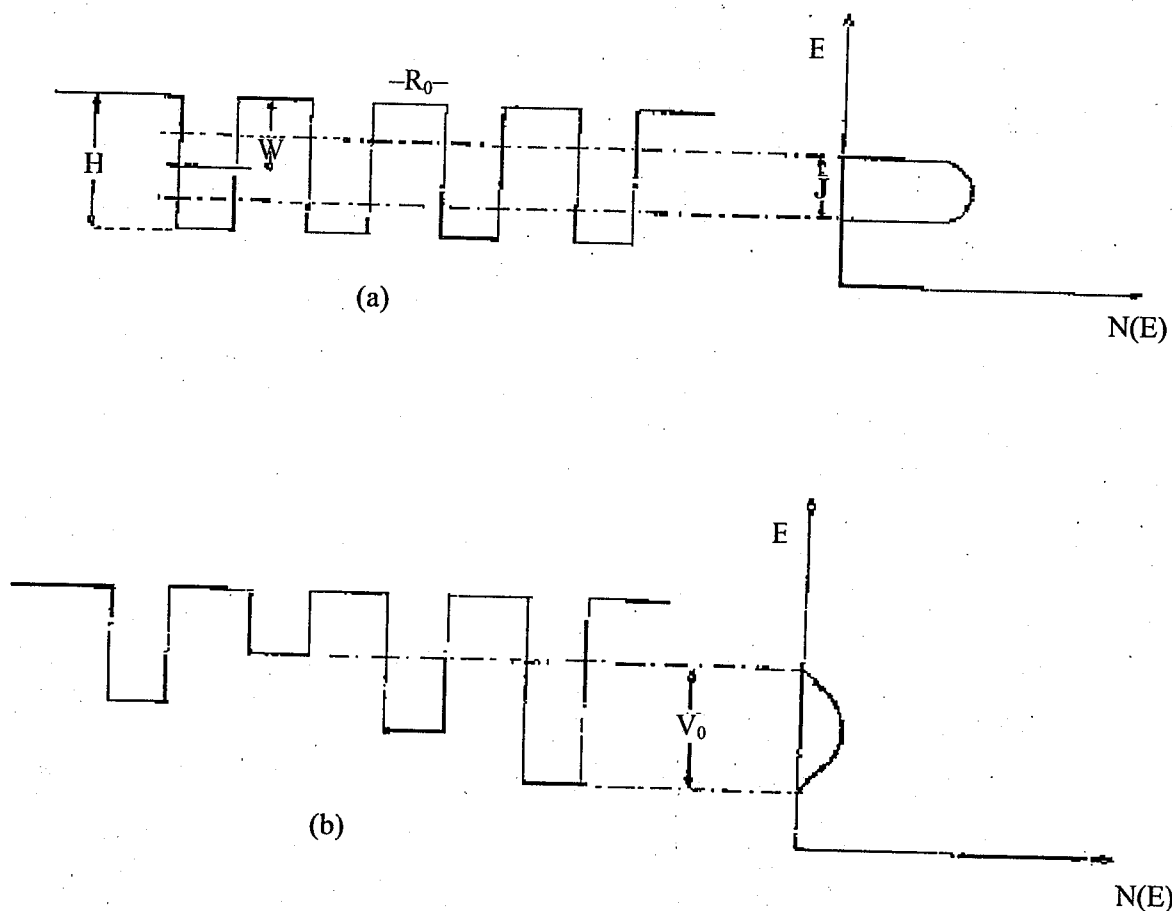


Fig. IV-2 : Modèle d'Anderson : (a) arrangement cristallin des puits de potentiel, séparés par une distance R_0 , contenant des états S une profondeur W , formant une bande de largeur J .
 (b) même arrangement avec un potentiel aléatoire imposé sur chaque puits, formant une bande de largeur V_0 .

... aléatoire qui est schématisée sur la figure (IV.1). Ce modèle est caractérisé par : l'asymétrie de la fonction densité d'états et par la présence d'une queue de bande vers les faibles énergies. Les états de la queue de bande sont des états localisés. Il s'agit là d'un désordre structural.

I.2.2 - Modèle du potentiel Gaussien de bruit blanc :

C'est un modèle dans lequel la répartition des potentiels $V(x)$ est décrite par une fonction de distribution de Gauss, avec une fonction d'autocorrélation :

$$\langle \Delta V(x) \Delta V(x') \rangle = \frac{D}{2} \delta(x - x') \quad \text{Eq. IV -1.}$$

Où $\Delta V(x)$ représente la déformation de $V(x)$ par rapport à sa valeur moyenne, et D est une constante. Les sites sont répartis régulièrement et les amplitudes de Fourier du potentiel présentent des distributions Gaussiennes, avec des fluctuations indépendantes de la fréquence (nombre d'onde) et sont sans corrélation aux différentes fréquences. Ce modèle est utilisé pour décrire la déformation thermique du potentiel sur une corde continue et élastique ; c'est un désordre cellulaire.

I.2.3 - Modèle d'Anderson :

Considérons tout d'abord un arrangement cristallin tridimensionnel de potentiels, ayant chacun une profondeur H . Chaque puits de potentiel est tel qu'un électron puisse occuper un état s à une profondeur W (figure IV.2). La fonction d'onde de l'électron dans un seul puits décroît avec la distance comme :

$$\psi = \text{const.} \cdot \frac{1}{r} \exp(-\alpha r) \quad \text{Eq. IV-2.}$$

Avec
$$\alpha^2 = \frac{2mW}{\hbar^2}$$

Les puits de potentiels étant de profondeur finie, les niveaux d'énergie s'élargissent en bandes dont la largeur, selon l'approximation des liaisons fortes, est :

$$J = 2zI$$

où z est le nombre de coordination (nombre des plus proches voisins d'un atome donné); I représente l'intégrale de recouvrement donnée par:

$$I = w \cdot \exp(-\alpha R_0) ; W = c \alpha \hbar v / R_0 \quad \text{Eq. IV-3.}$$

où R_0 est la distance entre deux proches voisins, v le volume occupé par chaque site, et c une constante voisine de l'unité. La condition de validité de l'approximation des liaisons fortes est :

$$J \ll W$$

Le modèle d'Anderson s'obtient en ajoutant sur chaque puits un potentiel aléatoire $V = \pm V_0/2$ (figure IV.2.b). La valeur moyenne des fluctuations du potentiel est définie par : $\langle V^2 \rangle = V_0^2$, V_0 représente donc la mesure du désordre. Il est clair que le désordre n'est sensible que si $V_0 \gg J$ sous réserve que $V_0 \ll W$. Si V_0 est faible, il a pour effet d'introduire un libre parcours moyen L qui peut être calculé par l'approximation de Born.

$$\frac{1}{L} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{V_0}{2} \right)^2 \frac{R_0^3 N(E)}{U} \quad \text{Eq IV-4.}$$

où l'énergie E et la vitesse u sont prises au niveau de Fermi. L'application des formules pour l'électron libre, puisque V_0 est faible,

$$\frac{R_0}{L} = \left(\frac{V_0}{I} \right)^2 \cdot \frac{1}{16 \pi} \quad \text{Eq. IV-5}$$

Soit :

$$\left(\frac{V_0}{J} \right)^2 = 64 \pi Z^2 \frac{R_0}{L} \quad \text{Eq IV-6.}$$

Etant relié au libre parcours moyen le rapport V_0/J doit présenter une valeur critique à partir de laquelle les états énergétiques deviendraient localisés. Selon Anderson les états sont tous localisés quand $V_0/J > 5$, pour $z=6$. Dans le cas contraire ils sont localisés ou délocalisés.

Ce modèle est caractérisé par la symétrie présentée par la courbe de la densité d'états $N(E)$. Les états localisés se rencontrent dans les deux queues de bandes où la densité d'états est faible. Il existe alors deux énergies, E_c et E'_c , critiques qui séparent les états localisés des états étendus; ces énergies critiques sont telles que E_c soit située au bas de la bande des états étendus et E'_c soit située au sommet de celle-ci.

1.3 - Modèles de structures de bandes dans les systèmes désordonnés :

Dans le cas des systèmes désordonnés il n'existe pas de modèle unique pouvant rendre compte de toutes leurs propriétés; ceci est évidemment dû à leur très grande diversité. Cependant il existe quelques modèles qui semblent s'adapter plus ou moins bien à l'interprétation des résultats obtenus (essentiellement dans le cas des semi-conducteurs amorphes).

1.3.1 - Modèle de: Cohen-Fritzsche-Ovshinsky (C.F.O) :

En accord avec le modèle d'Anderson les fluctuations du potentiel causées par un désordre de translation et un désordre de composition sont assez importantes pour donner naissance à des états localisés dans les queues de bandes qui pénètrent

profondément dans la bande interdite et se chevauchent. Par état localisé il faut entendre un état dont la fonction d'onde a une amplitude qui décroît exponentiellement avec la distance, à partir du centre de localisation ; surtout pour des distances suffisamment grandes. A cause du chevauchement des deux bandes. Un état localisé de la bande de valence peut être d'énergie supérieure à celle d'un état localisé de la bande de conduction. Les états de la bande de conduction sont localement neutres quand ils sont vides alors que ceux de la bande de valence sont neutres quand ils sont occupés. Les états vides en queue de bande de valence donnent alors naissance à une distribution aléatoire de charges positives localisées, neutralisée en moyenne par une distribution similaire d'un même nombre de charges négatives localisées qui sont associées aux états occupés en queue de bande de conduction. Le niveau de Fermi F se trouve alors dans la zone de chevauchement près du milieu de la bande interdite, où la densité d'états est presque à son minimum.

Il est supposé que la transition de la zone d'états étendus à celle des états localisés se produit pour des énergies E_v et E_c , valeurs définissant le gap de mobilité, et appelées fronts de mobilité. Ce gap de mobilité ne contient que des états localisés. Pour $E = E_c$ ou $E = E_v$ et $T = 0$ K, la mobilité varie de façon abrupte mais continue, passant d'une valeur élevée du côté des états étendus à une valeur très faible du côté des états localisés.

I.3.2 - Modèle de Mott et Davis :

Les fronts de mobilité sont encore en E_c et E_v , mais une distinction très importante par rapport au modèle C.F.O est introduite entre les états localisés. On distingue les états localisés résultants de la disparition de l'ordre à grande distance de ceux provenant des défauts de structure. Le premier groupe s'étend dans le gap de mobilité entre E_A et E_B ; le deuxième constitue des queues de bandes plus longues, mais de densité trop faible pour fixer le niveau de Fermi. Ce dernier, selon Mott et Davis est fixé par l'existence d'une bande d'états compensés située près du centre du gap de mobilité. Cette nouvelle bande permet également de tenir compte du comportement de la conductivité en courant alternatif. Selon Mott cette bande pourrait se scinder en une bande de donneurs et une bande d'accepteurs.

I.4 - Mécanismes de conduction dans les structures désordonnées :

L'étude de la mobilité $\mu(E)$ des porteurs de charges est liée à celle de la densité d'états $N(E)$. La connaissance de la structure de bande d'un système en permet l'évaluation de la mobilité. Pour un même système désordonné deux cas sont à considérer :

- Les états sont étendus
- Les états sont localisés.

I.4.1 - Conduction dans les états délocalisés :

L'expression de la mobilité va être différente, selon que ces états sont très délocalisés, $E \gg E_c$, ou $E \ll E_v$, ou bien peu délocalisés, $E \approx E_c$.

I.4.1.1 - Conduction dans les états très délocalisés :

Si l'on se place à des énergies très supérieures à la limite de localisation E_c , les électrons sont situés dans des états qui sont ceux de la bande de conduction du matériau cristallin correspondant. L'expression de la mobilité est alors une fonction du temps de relaxation τ de l'électron et de la masse effective de ce dernier.

$$\mu = \frac{e \cdot \tau}{m^*}$$

Eq. IV-7.

I.4.1.2 - Conduction dans les états peu délocalisés :

Le type de conduction décrit dans le paragraphe précédent suppose que le libre parcours moyen L est grand devant la distance interatomique a . La diffusion des électrons d'un état de Bloch dans un autre est alors occasionnelle. Si l'on accroît le désordre, on augmente le nombre de centres de diffusion et l'on diminue le libre parcours moyen jusqu'à la transition d'Anderson où tous les états deviennent localisés. Il existe un petit domaine d'énergie juste au dessus (en dessous) de la limite de localisation E_c (E_v) où les états ne sont pas encore localisés et pour lesquels le libre parcours moyen L est voisin de la distance interatomique. Dans ce cas le mouvement

des électrons est un mouvement Brownien. Un électron peut être considéré en moyenne comme sautant de façon incohérente d'un état à un autre. On a simultanément des états délocalisés et des sauts au dessus de la limite de localisation. Si l'on suppose que la distance du saut est constante et égale à la distance interatomique, on peut montrer pour des sauts non corrélés que la constante de diffusion D est :

$$D = \frac{1}{6} v_{el} a^2 \quad \text{Eq IV-8}$$

La relation d'Einstein permet alors d'en déduire l'expression de la mobilité :

$$\mu = \frac{eD}{kT} = \frac{1}{6} \frac{ea^2}{kT} v_{el} \quad \text{Eq IV-9}$$

Où v_{el} est la fréquence moyenne avec laquelle un électron saute d'un site à l'autre dans n'importe quelle direction, ce qui justifie le facteur 1/6.

1.4.2 - Conduction dans les états localisés :

Si le critère de localisation d'Anderson est satisfait, un électron peut se déplacer d'un site à l'autre seulement par saut activé thermiquement (hopping). Cela signifie qu'il se déplace d'un état localisé à un autre par émission ou absorption d'un phonon. La probabilité P pour qu'un électron saute d'un état localisé A à un autre état B différent, ayant une énergie supérieure, dépend des facteurs suivants :

Le facteur de Boltzmann $\exp\left(-\frac{\Delta W}{kT}\right)$ où ΔW représente l'énergie d'activation nécessaire au saut de l'électron, et égale la différence d'énergie entre les deux états concernés.

- Un facteur v_{ph} dépendant du spectre des phonons, et représentant la fréquence du phonon mis en jeu.

- Un facteur dépendant du recouvrement des fonctions des deux états concernés, il vaut $\exp(-2\alpha R)$ où R est la distance entre les deux centres et α le coefficient d'atténuation de l'enveloppe de la fonction d'onde des états localisés. Finalement nous aurons en utilisant la relation du coefficient de diffusion et de la probabilité de diffusion :

$$D = R^2 P = R^2 v_{ph} \exp\left(-2\alpha R - \frac{\Delta W}{kT}\right) \quad \text{Eq IV-10.}$$

Or
$$\mu = \frac{De}{kT}$$

$$\mu = \frac{eR^2 v_{ph}}{kT} \exp\left(-2\alpha R - \frac{\Delta W}{kT}\right) \quad \text{Eq. IV-11.}$$

1.4.2.1 - Etats très localisés :

La fonction d'onde d'un état localisé décroît très vite avec la distance, le coefficient d'atténuation α étant très grand. Le recouvrement entre états voisins est très faible et n'intervient qu'avec le plus proche voisin; à chaque saut l'électron ne peut se déplacer plus loin que celui-ci. Nous pouvons alors estimer l'énergie d'activation ΔW comme suit :

Soit a la distance moyenne entre deux proches voisins; la distance moyenne du saut est donc égale à a . Par conséquent la densité des centres par unité de volume sera $1/a^3$. Si ΔW est l'énergie moyenne du saut, on peut admettre que les niveaux où s'effectue ce type de conduction occupent une largeur δE , en énergie, de l'ordre de ΔW . Si l'on appelle $N(E)$ la densité d'états par unité de volume et d'énergie, et en supposant qu'elle est sensiblement constante la densité des centres par unité de volume est donc :

$$N(E) \cdot \delta E = N(E) \cdot \Delta W = \frac{1}{a^3} \quad \text{Eq IV-12.}$$

$$\Delta W = \frac{1}{a^3 n(E)}$$

Finalement la mobilité prend la valeur particulière :

$$\mu = \frac{ea^2}{kT} v_{ph} e^{-2\alpha a} \exp\left(-\frac{1}{a^3 N(E) \cdot kT}\right) \quad \text{Eq.IV-13.}$$

1.4.2.2 - Etats peu localisés :

C'est le cas des états d'énergie proche de la limite de localisation. Dans ce cas le coefficient d'atténuation α est plus petit et peut être défini de sorte que $1/\alpha$ soit supérieur à la distance a entre deux centres. Par suite, dans une direction donnée, les états situés à une distance $R \leq 1/\alpha$ sont tels que le facteur $\exp(-2\alpha R)$ peut être pris égal à l'unité. Comme les états sont en moyenne distants de a , il y a $1/\alpha a$ (où 1 représente la distance totale des états extrêmes) états pour lesquels l'approximation précédente est valable. Le nombre d'états correspondant pour les trois directions est en moyenne :

$$\Phi = \frac{1}{(\alpha a)^3} \quad \text{Eq. IV-14.}$$

Puisque l'électron a un grand choix de centres de saut, la probabilité de saut ainsi que la mobilité sont à multiplier par Φ ; à savoir

$$\mu = \frac{ea^2}{kT} v_{ph} \cdot \Phi \cdot \exp \left(- \frac{\Delta W}{kT} \right) \quad \text{Eq IV-15.}$$

L'électron sautera normalement dans un volume. $1/\alpha^3$ contenant un site accessible. Ce volume représente l'écart d'énergie ΔW le plus faible possible. Ainsi à chaque site de départ est associé un volume $1/\alpha^3$, soit α^3 sites par unité de volume finalement :

$$\Delta W = \frac{\alpha^3}{N(E)} \quad \text{Eq. IV-16.}$$

$$\mu = \frac{ea^2}{kT} v_{ph} \cdot \frac{1}{(\alpha a)^3} \cdot \exp \left(- \frac{\alpha^3}{N(E)kT} \right) \quad \text{Eq IV-17.}$$

Nous notons que les deux expressions sont différentes :

- par le terme $\exp(-2 \alpha a)$
- par la forme du second terme exponentiel qui n'est pas tout fait le même.

En restant toujours dans le cas des états localisés nous décrivons un nouveau processus de conduction intervenant aux basses températures.

1.4.3 - Conduction par saut à distance variable :

La quantité essentielle pour la probabilité de saut est :

$$2 \alpha R + \frac{\Delta W}{kT} \quad \text{Eq IV-18.}$$

L'électron va essayer de trouver à l'extrémité de son saut un site dont l'écart énergétique avec le niveau de départ est le plus faible possible, et est compatible avec la diminution de l'énergie des phonons qu'il absorbe. Plus long sera son saut, plus

grand sera le choix possible d'états accessibles, et en général il sautera dans un site pour lequel l'énergie est la plus faible possible. Nous allons maintenant donner rapidement une évaluation quantitative de la mobilité correspondante à ce phénomène.

Si l'électron saute jusqu'à une distance R du site de départ, le volume accessible associé est $4\pi R^3/3$; donc le nombre de sites par unité de volume est $(4\pi R^3/3)^{-1}$, soit :

$$\Delta W = \frac{1}{\frac{4}{3}\pi R^3 N(E)} \quad \text{Eq IV-19}$$

$$\text{Posons : } f(R) = 2\alpha R + \frac{\Delta W}{kT} = 2\alpha R + \frac{3}{4\pi R^3 N(E)kT} \quad \text{Eq IV-20}$$

La détermination de la distance du saut est possible en faisant en sorte que la probabilité du saut prenne sa valeur maximale pour cette valeur de R , ce qui reviendrait à écrire et à résoudre :

$$\frac{df}{dR} = 0 \quad \text{Eq IV-21}$$

Ce calcul donne la distance moyenne du saut :

$$R = \left(\frac{9}{8\pi\alpha N(E)kT} \right)^{1/4} \quad \text{Eq IV-22}$$

$$\mu = \frac{eR^2}{kT} v_{ph} \exp(-BT^{-1/4}) \quad \text{Eq IV-23}$$

$$\beta = \frac{8}{3} \frac{\alpha^{3/4}}{N(E)^{1/4}} \left(\frac{9}{8\pi k} \right)^{1/4} \quad \text{Eq IV-24.}$$

Ainsi pour des températures très basses la conduction se fait selon une loi en $T^{-1/4}$ contrairement aux deux cas ordinaires précédents où elle se fait suivant une loi en T^{-1} .

II - Conduction par saut dans les systèmes désordonnés :

II.1 - Introduction :

Dans la partie précédente, nous avons étudié la conductivité d'un système à deux phases en fonction de la fraction de volume conducteur. Il s'agit maintenant d'étudier le phénomène de conduction par saut qui se produit aux basses températures pour les systèmes cristallins et amorphes. Ce phénomène se rencontre également dans les systèmes granulaires aussi bien pour des températures élevées que pour des températures basses. Nous reviendrons sur ce point dans le paragraphe traitant les métaux granulaires. L'approche qui semble actuellement la plus utilisée dans l'étude de ce mécanisme de conduction est la percolation.

II.2 - Expression de la conductivité en fonction de la température :

Le mécanisme de hopping est celui de la conduction par saut à distance variable. Le hopping est un phénomène qui se produit grâce aux vibrations thermiques du réseau aux températures moyennement basses et ne concerne que les plus proches voisins. La conduction par saut à distance variable peut concerner des sites plus éloignés, et se produit pour les très basses températures.

En accord avec la définition d'Anderson, un état est localisé si l'amplitude de la fonction d'onde correspondante décroît exponentiellement avec la distance à partir du centre de localisation. Cet état est plus ou moins localisé selon l'importance de la décroissance de l'enveloppe de la fonction d'onde. Si cette dernière chevauche avec celle de l'état sur le site voisin, les deux états sont étendus.

Considérons un volume V assez grand contenant une densité finie de pièges répartis aléatoirement dans l'espace et en énergie. Imaginons un lien entre chaque paire de pièges porteurs d'états délocalisés. Plusieurs cas sont possibles :

- Tous les états du système sont localisés et il n'existe aucun lien entre les pièges qui sont tous indépendants.

- Tous les états du système sont délocalisés ; et il existe partout dans le système des liens entre les pièges formant ainsi un réseau d'étendue égale au système. Cependant l'importance de chaque lien du réseau dépend du degré de délocalisation des états de la paire de sites correspondants. Des sites sont plus fortement liés que d'autres.
- Les états délocalisés sont regroupés par petits amas séparés par des zones de pièges porteurs d'états localisés.

Si l'on appelle $\tilde{\eta}$ le nombre moyen de liens par site correspondant à la densité critique de percolation, les fonctions d'onde restent localisées si la moyenne des pièges est inférieure à $\tilde{\eta}$.

II.3 - Mécanisme de conduction par saut :

Considérons un système dans lequel les états situés au voisinage du niveau de Fermi sont tous localisés, et la conduction s'y produit par saut direct de piège en pièges. Les pièges sont répartis aléatoirement en énergie; la conduction nécessite l'appui des vibrations thermiques du réseau pour assurer la conservation de l'énergie. La température est supposée suffisamment basse pour que les électrons excités ne puissent pas traverser le gap et la densité d'états localisés suffisamment élevée pour que le mécanisme de conduction par saut soit prédominant.

Soient E_i et E_j les énergies des sites i et j .

U_{ij} le taux de transition intrinsèque pour un électron sautant du site i au site j supposé vide. Le taux de transition dépend des distances spatiales et énergétiques entre les sites i et j , à savoir :

$$U_{ij} = U(R_{ij}, E_i - E_j) \quad \text{Eq IV-25}$$

Si n_i^p et n_j^v sont les probabilités pour que les sites i et j soient respectivement plein et vide, la valeur moyenne sur le temps du taux de transition entre i et j s'écrira :

$$\Gamma_{ij} = \langle U_{ij} \rangle_t = \langle n_i^p n_j^v U_{ij} \rangle = \langle n_i (1 - n_j) U_{ij} \rangle \quad \text{Eq IV-26.}$$

Où n_i et n_j représentent les nombres d'occupation des sites i et j . La poursuite de cette étude nécessite d'imposer les conditions suivantes :

- L'interaction électron - électron est supposée négligeable.
- Chaque site peut porter plus d'un électron.

Ainsi U_{ij} sera indépendant de n_i et de n_j ; et Γ_{ij} s'écrira :

$$\Gamma_{ij} = \langle n_i (1 - n_j) \rangle U_{ij} \quad \text{Eq IV-27}$$

D'autre part à l'équilibre thermique n_i et n_j sont statistiquement indépendants, à savoir : $\langle n_i n_j \rangle = \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle$

Avec :

$$\langle n_i \rangle = n_i^0 = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_i - E_F}{kT}}} \quad \text{Eq IV-28}$$

Si l'origine des énergies est prise en $E_f = 0$; cette expression devient :

$$\langle n_i \rangle = n_i^0 = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E_i}{kT}\right)}}$$

Comme le processus considéré est également celui de l'effet tunnel la dépendance de U_{ij} et R_{ij} doit être essentiellement exponentielle soit :

$$U_{ij} \propto e^{-2\alpha R_{ij}}$$

Par contre la dépendance de U_{ij} en énergie est moins évidente; elle est généralement prise sous forme exponentielle :

$$\begin{cases} U_{ij} \propto \exp \left[- \left[\frac{E_j - E_i}{kT} \right] \right] & \text{si } E_j > E_i \text{ (absorption de phonons)} \\ U_{ij} \text{ Indépendant de } E_i \text{ et } E_j \text{ si } E_j < E_i \end{cases} \quad \text{Eq IV-30.}$$

Finalement le taux de transition s'écrit :

$$U_{ij} = \begin{cases} U_0 \exp \left[-2\alpha R_{ij} - \frac{(E_j - E_i)}{kT} \right] & \text{si } E_j > E_i \text{ (absorption de phonons)} \\ U_0 \exp \left[-2\alpha R_{ij} \right] & \text{si } E_j < E_i \text{ (sans absorption de phonons). Eq IV-31} \end{cases}$$

La première expression donne le taux de transition dans le cas d'un phénomène de hopping, assisté par les phonons combiné avec le phénomène d'effet tunnel. La deuxième expression représente l'effet tunnel seul.

La grandeur U_0 est une constante dépendant de la force de couplage électron - phonon, de la densité d'état des phonons, des propriétés du matériau et faiblement de E_i, E_j, R_{ij} ,

L'expression éq IV-31, donnant le taux de transition U_{ij} pourrait se condenser en une seule. Et effet :

$$\Gamma_{ij} = \langle n_i (1 - n_j) \rangle U_{ij} = n_i^0 (1 - n_j^0) U_{ij} \quad \text{Eq IV-32.}$$

Avec

$$\langle n_i \rangle = n_i^0 = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{E_i}{kT} \right]}$$

1^{er} cas : $E_j > E_i$ et $KT \ll E_i, E_j$

$$\Gamma_{ij} = U_0 \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_i}{kT}\right]} \frac{\exp\left[\frac{E_j}{kT}\right]}{1 + \exp\left[\frac{E_j}{kT}\right]} \exp\left[-2\alpha R_{ij} - \left(\frac{E_j - E_i}{kT}\right)\right]$$

$$\Gamma_{ij} \approx U_0 \exp\left[\frac{-2\alpha R_{ij}}{kT}\right] \exp\left[\frac{E_i - E_j - E_i}{kT}\right] = U_0 e^{-2\alpha R_{ij}} e^{\left[\frac{-E_i - E_j - (E_j - E_i)}{2kT}\right]} \quad \text{Eq IV-33.}$$

2^{ème} cas : $E_j < E_i$ et $kT \ll E_i, E_j$.

$$\Gamma_{ij} = U_0 \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_i}{kT}\right]} \frac{\exp\left[\frac{E_j}{kT}\right]}{1 + \exp\left[\frac{E_j}{kT}\right]} \exp[-2\alpha R_{ij}]$$

$$\Gamma_{ij} \approx U_0 \exp[-2\alpha R_{ij}] \exp\left[\frac{E_j - E_i - E_j}{kT}\right] = U_0 e^{-2\alpha R_{ij}} e^{\left[\frac{-E_i - E_j - (E_i - E_j)}{2kT}\right]}$$

EqIV-34.

La combinaison des deux cas permet alors de déduire une relation formulant les deux éventualités. Sachant que les énergies E_i et E_j sont toutes deux positives puisque supérieures au niveau de Fermi, cette relation s'écrira :

$$\Gamma_{ij} \approx U_0 \exp\left[-2\alpha R_{ij} - \left(\frac{|E_i| + |E_j| + |E_i - E_j|}{2kT}\right)\right] \quad \text{Eq IV-35.}$$

II.4 - Conductivité :

Il s'agit de déterminer l'expression de la conductivité électrique en se basant sur les estimations précédentes. Pour cela le problème sera réduit à celui de l'étude d'un réseau de résistances aléatoires, puis il sera ramené à un problème de percolation.

II.4.a - Formulation par un réseau de résistances :

Un champ électrique \mathcal{E} faible est appliqué au système. Par conséquent le taux de transition U_{ij} devra dépendre du travail qu'il faudrait fournir à l'électron pour le faire passer du site i au site j . Il devient :

$$U_{ij}(\mathcal{E}) = U(R_{ij}, E_i - E_j + e\mathcal{E}R_{ij})$$

Comme \mathcal{E} est un champ faible, cela se traduit par la forme suivante du taux de transition :

$$U_{ij}(\mathcal{E}) = U_{ij}^0 + \delta U_{ij} \quad \text{Eq IV-36.}$$

Les nombres d'occupation n_i se trouvent également modifiés par ce champ électrique. Cette modification de n_i se manifeste par une variation du potentiel chimique, soit.

$$\langle n_i \rangle = n_i^0 + \delta n_i = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{E_i - \delta u_i}{kT} \right]} \quad \text{Eq IV-37.}$$

Le flux moyen entre le site i et le site j s'écrira :

$$\Gamma_{ij}(\mathcal{E}) - \Gamma_{ji}(\mathcal{E}) = n_i(1 - n_j)(U_{ij} + \delta U_{ij}) - n_j(1 - n_i)(U_{ji} + \delta U_{ji}) \quad \text{Eq IV-38}$$

$$n_i(1 - n_j) = (n_i^0 + \delta_{ni})(1 - n_j^0 - \delta_{nj})$$

$$= n_i^0(1 - n_j^0) \left(1 + \frac{\delta_{ni}}{n_i^0} \right) \left[1 - \frac{\delta_{nj}}{1 - n_j^0} \right]$$

$$n_j(1 - n_i) = n_j^0(1 - n_i^0) \left(1 + \frac{\delta_{nj}}{n_j^0} \right) \left[1 - \frac{\delta_{ni}}{1 - n_i^0} \right]$$

$$U_{ij} + \delta U_{ij} = U_{ij} \left(1 + \frac{\delta U_{ij}}{U_{ij}} \right)$$

Eq IV-39

Ceci donne le flux moyen :

$$\Gamma_{ij}(\varepsilon) - \Gamma_{ji}(\varepsilon) = n_i^0(1 - n_j^0)U_{ij} \left\{ \left(1 + \frac{\delta_{ni}}{n_i^0} \right) \left(1 - \frac{\delta_{nj}}{1 - n_j^0} \right) \left(1 + \frac{\delta U_{ij}}{U_{ij}} \right) \right\} - n_j^0(1 - n_i^0)U_{ji}$$

$$\left\{ \left(1 + \frac{\delta_{nj}}{n_j^0} \right) \left(1 - \frac{\delta_{ni}}{1 - n_i^0} \right) \left(1 + \frac{\delta U_{ji}}{U_{ji}} \right) \right\}$$

$$= \Gamma_{ij}^0 \left\{ \left(1 + \frac{\delta_{ni}}{n_i^0} \right) \left(1 - \frac{\delta_{nj}}{1 - n_j^0} \right) \left(1 + \frac{\delta U_{ij}}{U_{ij}} \right) - \left(1 + \frac{\delta_{nj}}{n_j^0} \right) \left(1 - \frac{\delta_{ni}}{1 - n_i^0} \right) \left(1 + \frac{\delta U_{ji}}{U_{ji}} \right) \right\} \text{ Eq IV-40}$$

Etant donné que l'énergie kT a été prise largement inférieure aux énergie de sites, il est possible d'évaluer d'une façon approchée le flux moyen. En effet, au premier ordre ce bilan s'écrira :

$$\Gamma_{ij}(\varepsilon) - \Gamma_{ji}(\varepsilon) = \Gamma_{ij}^0 \left\{ \frac{\delta U_{ij}}{U_{ij}} - \frac{\delta U_{ji}}{U_{ji}} + \delta n_i \left(\frac{1}{n_i^0} + \frac{1}{1 - n_i^0} \right) - \delta n_j \left(\frac{1}{n_j^0} + \frac{1}{1 - n_j^0} \right) + \dots \right\} \text{ Eq IV-41}$$

Chacun des trois termes de cette somme peut être évalué de façon approximative dans le cas où l'énergie kT est largement inférieure aux énergies de sites. Tout d'abord n_i^0 est largement inférieure à l'unité, soit :

$$n_i^0 = \left(1 + e^{\frac{E_i}{kT}} \right)^{-1} \ll 1$$

Ainsi :

$$\delta n_i \left(\frac{1}{n_i^0} + \frac{1}{1 - n_i^0} \right) = \frac{\delta n_i}{n_i^0 (1 - n_i^0)} \approx \frac{\delta n_i}{n_i^0}$$

Or :

$$n_i^0 + \delta n_i = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E_i - \delta \mu_i}{kT} \right)}} \Rightarrow n_i^0 \left(1 + \frac{\delta n_i}{n_i^0} \right) = \frac{1}{1 + e^{\left(\frac{E_i - \delta \mu_i}{kT} \right)}}$$

$$1 + \frac{\delta n_i}{n_i^0} = \frac{1 + e^{\frac{E_i}{kT}}}{1 + e^{\frac{E_i}{kT}} e^{\frac{-\delta \mu_i}{kT}}} \Rightarrow \frac{\delta n_i}{n_i^0} = \frac{e^{\frac{E_i}{kT}} \left(1 - e^{\frac{-\delta \mu_i}{kT}} \right)}{1 + e^{\frac{E_i}{kT}} e^{\frac{-\delta \mu_i}{kT}}}$$

$$\frac{\delta n_i}{n_i^0} \approx \frac{\delta \mu_i}{kT}$$

D'où :

$$\delta n_i \left(\frac{1}{n_i^0} + \frac{1}{1 - n_i^0} \right) \approx \frac{\delta n_i}{n_i^0} \approx \frac{\delta \mu_i}{kT}$$

$$\delta n_j \left(\frac{1}{n_j^0} + \frac{1}{1 - n_j^0} \right) \approx \frac{\delta n_j}{n_j^0} \approx \frac{\delta \mu_j}{kT}$$

Eq IV-42

Le premier terme de la relation Eq. IV-41 représente la différence des pourcentages des taux de transition directe et inverse.

Le taux de transition en présence du champ est donné par la relation (Eq.IV-36) par conséquent :

$$\delta U_{ij} = U_{ij}(\varepsilon) - U_{ij}^0 = \frac{\partial U_{ij}(\varepsilon)}{\partial(E/kT)} \delta(E/kT) \quad \text{Eq IV-43}$$

où E représente l'énergie totale mise en jeu au cours de la transition la considération de $U_{ij}(\varepsilon)$ sous la forme exponentielle EqIV-31 permet d'écrire :

$$\frac{\partial U_{ij}(\varepsilon)}{\partial(E/kT)} = U_{ij}(\varepsilon) \approx U_{ij} \quad \text{Eq IV-44}$$

donc :

$$\delta U_{ij} = U_{ij} \delta(E/kT) \quad \text{Eq IV-45}$$

Or la variation énergétique est fournie par le champ ε ; par suite :

$$\delta(E/kT) = e\varepsilon R_{ij} \cdot \frac{1}{2kT} \quad \text{Eq IV-46}$$

finalement :

$$\frac{\delta U_{ij}}{U_{ij}} \approx e\varepsilon R_{ij} \cdot \frac{1}{2kT}$$

$$\frac{\delta U_{ji}}{U_{ji}} \approx e\varepsilon R_{ji} \cdot \frac{1}{2kT} \quad \text{Eq IV-47}$$

Soit :
$$\frac{\delta U_{ij}}{U_{ij}} - \frac{\delta U_{ji}}{U_{ji}} = e\varepsilon(R_{ij} - R_{ji}) \frac{1}{2kT} = e\varepsilon R_{ij} \cdot \frac{1}{kT} \quad \text{Eq IV-48}$$

Compte tenu des relations (Eq IV-42) et (Eq IV48) le flux de transition (Eq IV-41) devient :

$$\Gamma_{ij}(\varepsilon) - \Gamma_{ji}(\varepsilon) = \Gamma_{ij}^0 \left\{ e\varepsilon R_{ij} + \delta\mu_i - \delta\mu_j + \dots \right\} \frac{1}{kT} \quad \text{Eq IV-49}$$

Cette expression donnant le flux moyen d'électrons transistant entre les sites i et j va permettre la déduction du courant électrique qui s'établit entre ces même sites.

Si I_{ij} représente l'intensité du courant et e la charge d'un électron il en découle :

$$I_{ij} = e \left\{ \Gamma_{ij}(\varepsilon) - \Gamma_{ji}(\varepsilon) \right\} = \frac{e}{kT} \Gamma_{ij}^0 \left\{ e\varepsilon R_{ij} + \delta\mu_i - \delta\mu_j + \dots \right\} \quad \text{Eq IV-50}$$

Du moment qu'un courant électrique a été défini entre les sites i et j il devient nécessaire d'associer une différence de potentiel globale V entre ces deux sites, définie par la différence énergétique ΔW_{ij}

$$\Delta W_{ij} = e\Delta V_{ij} = e\varepsilon R_{ij} + \delta\mu_i - \delta\mu_j \quad \text{Eq IV -51}$$

Soit :
$$I_{ij} = \frac{e}{kT} \Gamma_{ij}^0 \Delta W_{ij} = \frac{e^2}{kT} \Gamma_{ij}^0 \Delta V_{ij} \quad \text{Eq IV-52}$$

A partir de cette relation entre courant et tension, il en découle une conductance G_{ij} (ou Résistance R_{ij}) entre les sites i et j :

$$\frac{I_{ij}}{\Delta V_{ij}} = \frac{e^2}{kT} \Gamma_{ij}^0 = \frac{1}{R_{ij}} = G_{ij} \quad \text{Eq IV-53}$$

En conclusion, la conductance globale entre les sites i et j pour des champs faibles est indépendante de la valeur du champ et dépend seulement des distances spatiales R_{ij} et énergétique $|E_i - E_j|$ entre ces sites à champ électrique nul, soit :

$$G_{ij} = \frac{e^2}{kT} \Gamma_{ij}^0 (R_{ij}, |E_i - E_j|) \quad \text{Eq IV-54}$$

et plus généralement :
$$G_{ij} = \frac{e^2}{kT} \Gamma_{ij}^0 (R_{ij}, E_i, E_j)$$

Il est alors possible de considérer ce modèle comme un réseau réel constitué par des pièges répartis aléatoirement et reliés les uns aux autres par des conductances G_{ij} .

II.4.b - Invariant dimensionnel :

Avant de passer à l'évaluation de la loi de la conductivité par la théorie de percolation. Nous allons dans ce paragraphe essayer de déterminer le nombre de liaisons ouvertes par site pour cela :

Nous avons déterminé dans la troisième partie, la probabilité critique de percolation par le modèle de percolation de liaisons, nous avons trouvé les résultats suivants :

$P_c = 0,25$ Réseaux à trois dimensions

$P_c = 0,5$ Réseaux à deux dimensions

Si z est le nombre de coordination du réseau, nous remarquons d'après les résultats donnés par la table 1 que le nombre z_{p_c} ne dépend pas du type de réseau et qu'il dépend seulement de la dimension du réseau. Les valeurs de z_{p_c} représentent le nombre de liaisons ouvertes par site, ces résultats nous suggèrent les relations empiriques suivantes :

$$p_c \approx \frac{2}{z} \quad \text{pour un système à 2 dimensions.}$$

$$p_c \approx \frac{1,5}{z} \quad \text{pour un système à 3 dimensions.}$$

Ces relations sont vérifiées à quelques pour cent près et pour z variant de 3 à 12.

Ces deux relations peuvent être présentées comme suit :

$$zp_c \approx \frac{d}{d-1}$$

où d représente la dimension du système.

Ainsi dans un réseau à deux (trois) dimensions, une particule ne peut percoler que si elle trouve un voisinage d'au moins 2(1,5) liaisons non bloquées à chaque site.

Donc le nombre de liaisons ouvertes par site à p_c (probabilité critique de percolation) est un invariant dimensionnel du problème.

Table 1

Probabilités critique et invariants dimensionnels.

Réseaux	Z	P	Zp
Nid d'abeilles	3	0,6527	1,96
Carré	4	0,50	2
Triangulaire	6	0,3473	2,08

II.4.c - Evaluation de la loi de la conductivité par la théorie de percolation :

Il s'agit d'évaluer la conductance globale du réseau et de la relier à la conductivité de ce même réseau. Il est toujours possible de poser :

$$\sigma = \tilde{G} / \tilde{R}$$

EqIV-55

où \tilde{G} représentera une valeur caractéristique des conductances dans le réseau. \tilde{R} représentera une longueur caractéristique de l'étendue du réseau. Cependant, les conductances individuelles du réseau peuvent avoir divers ordres de grandeur ; le choix le plus correcte pour la valeur caractéristique \tilde{G} est celui de la conductance critique de percolation G_c ; soit $\tilde{G} \approx G_c$.

Cette conductance critique de percolation est définie comme étant la plus grande valeur de conductance, de sorte que le sous-ensemble de résistances pour lesquelles $G_{ij} > G_c$ constitue un réseau de connections qui couvre tout le système.

En d'autres termes c'est la valeur de la conductance à partir de laquelle les conductances G_{ij} sont concernées par la conduction. Il faut souligner qu'il n'existe aucun moyen pour déterminer le \tilde{R}^{-1} de façon précise et que ce dernier varie lentement avec les paramètres du réseau.

Ainsi les variations de la conductivité sont essentiellement dûes à la conductance critique de percolation G_c .

Comme les conductances du réseau ont des valeurs diverses, il est possible de les classer en trois catégories.

- Un ensemble de régions de haute conductivité isolées les unes des autres chacune contenant un amas de sites reliés par des conductances $G_{ij} \gg G_c$.
- Un nombre relativement faible de résistances dont les conductance G_{ij} sont de l'ordre de G_c et reliant les amas de haute conductance du premier groupe formant ainsi un réseau infini qui couvre tout le système. Ces deux types de résistances constituent le réseau critique.
- Un ensemble de résistances pour lesquelles les conductances G_{ij} sont largement inférieures à la conduction critique de percolation et qui ne sont pas prises en considération.

Il est important de noter que :

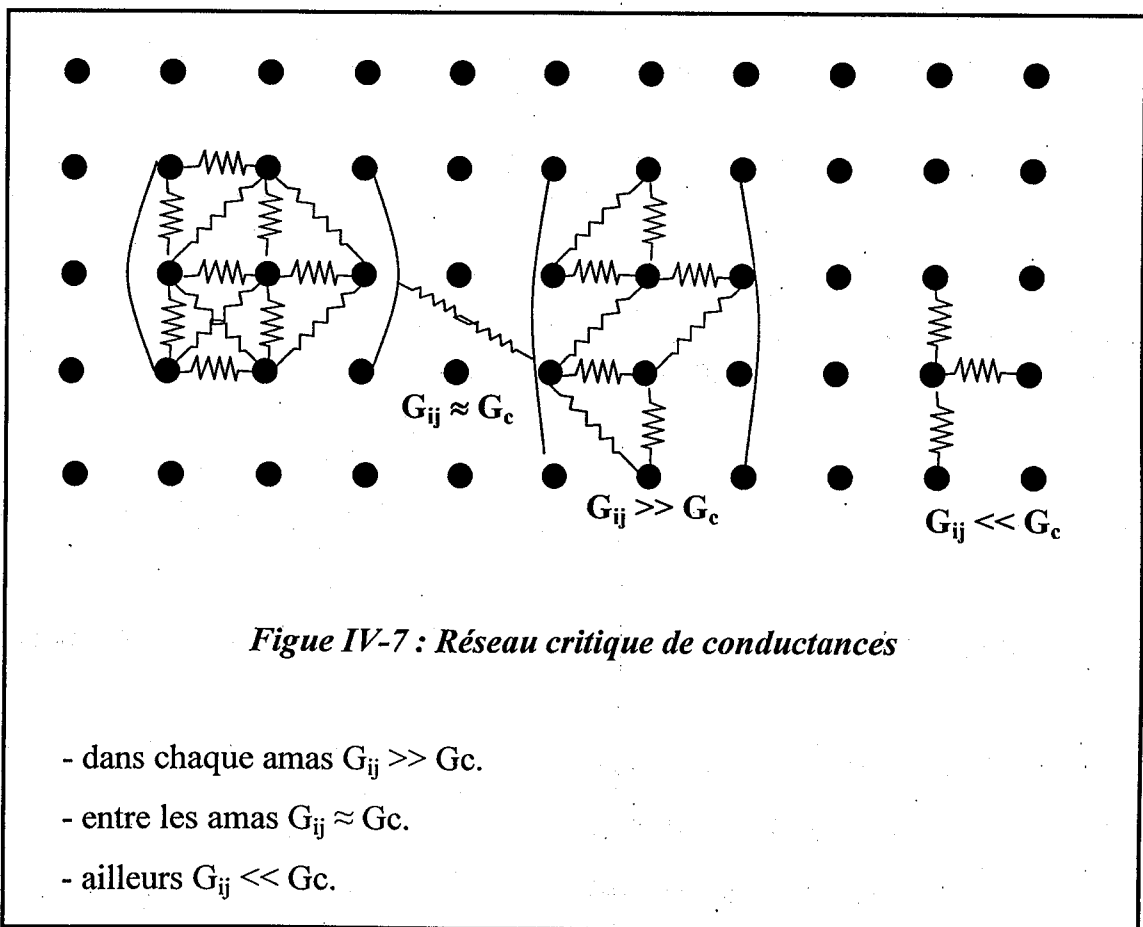
- 1- Si le système est désordonné les amas sont tous différents.
- 2- A l'intérieur de chaque amas la conductivité peut-être infinie sans pour autant affecter la conductivité globale du réseau ; celle-ci doit être finie car le courant doit passer à travers des conductances G_{ij} de l'ordre de G_c pour atteindre l'extrémité du système.

3- Ce sont alors les conductances G_{ij} de l'ordre de G_c qui déterminent la résistance du réseau. Les conductances telles que $G_{ij} \ll G_c$ ont une contribution négligeable à la conductivité car elles sont court-circuitées par le réseau critique de conductances ; $G_{ij} \approx G_c$

Nous allons maintenant évaluer la conductance critique de percolation pour obtenir la loi de variation de la conductivité en fonction de la température.

Le critère de conduction s'écrit : $G_{ij} > G_c$. Eq IV-56

$$\text{Or : } G_{ij} = \frac{e^2}{kT} \Gamma_{ij}^0 = \frac{e^2}{kT} U_0 \exp \left\{ -2\alpha R_{ij} - \frac{1}{2kT} (|E_i| + |E_j| + |E_i - E_j|) \right\} \text{ Eq IV-57}$$



La conductance critique de percolation s'écrit sous la forme suivante :

$$G_c = \frac{e^2}{kT} U_0 e^{-\Delta_c} \text{ Eq IV-58}$$

La condition de conduction devient alors :

$$e^{-\left(2\alpha R_{ij} + \frac{E_{ij}}{kT}\right)} > e^{-\Delta_c} \quad \text{où} \quad E_{ij} = \frac{1}{2} \left(|E_i| + |E_j| + |E_i - E_j| \right)$$

$$\text{donc} \quad 2\alpha R_{ij} + \frac{E_{ij}}{kT} < \Delta_c \quad \Rightarrow \quad \frac{R_{ij}}{\frac{\Delta_c}{2\alpha}} + \frac{E_{ij}}{kT \Delta_c} < 1 \quad \text{Eq IV-59}$$

Il est toujours possible de définir une distance maximale de hopping R_{\max} et une énergie de site maximale E_{\max} au-delà desquelles il ne serait plus possible d'avoir conduction dans le réseau, il suffit de poser :

$$\begin{cases} R_{\max} = \frac{1}{2\alpha} \Delta_c \\ E_{\max} = kT \Delta_c \end{cases} \quad \text{Eq IV -60}$$

D'où la condition de conductance (ou d'appartenance au réseau critique de conductances devient :

$$\frac{R_{ij}}{R_{\max}} + \frac{E_{ij}}{E_{\max}} < 1 \quad \text{Eq IV-61}$$

Cette dernière relation permet de conclure que :

- Toute conductance pour laquelle $R_{ij} > R_{\max}$ ne peut vérifier la condition d'appartenance au réseau critique de conductances quelques soient les valeurs de E_i et E_j .
- De même tout site tel que $|E_i| > E_{\max}$ ne peut vérifier la condition d'appartenance au réseau critique, quelque soit la valeur de E_j et aussi quelque soit la valeur de $R_{ij} = |r_i - r_j|$

Ce type de site doit être déconnecté du réseau critique. Si n est le nombre total de sites par unité de volume appartenant au réseau critique, c'est-à-dire tel que $|E_i| < E_{\max}$ et ρ_0 la densité d'états au niveau de Fermi, soit $\rho_0 = N(E_F)$ il en découle que :

$$n = 2 \rho_0 E_{\max} \quad \text{Eq IV-62}$$

Chacun de ces sites a un voisinage de $\left(\frac{8\pi}{3} R_{\max}^3 \rho_0 E_{\max} \right)$ voisins se trouvant à l'intérieur d'une distance égale à R_{\max} mais seulement $\frac{3}{40}$ de ces dernières liaisons satisfont au critère imposé par l'équation (IV-59) Ce qui revient à dire :

$$n(\Delta_c) = \frac{\pi}{5} \rho_0 E_{\max} R_{\max}^3 = \frac{\pi}{40} \rho_0 \frac{1}{\alpha^3} kT \Delta_c^4 \quad \text{Eq IV-63}$$

Mais $n(\Delta_c)$ représente l'invariant dimensionnel et qui est le nombre de liaisons ouvertes par site à p_c donc $n(\Delta_c) = z p_c = 1,5$ pour un système à 3 dimensions.

$$1,5 = \frac{\pi}{40} \rho_0 \frac{1}{\alpha^3} kT \Delta_c^4 \Rightarrow \Delta_c = \left(\frac{60 \alpha^3}{\pi \rho_0 kT} \right)^{1/4} = \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4}$$

avec :

$$T_0 = \frac{60 \alpha^3}{\pi \rho_0 k}$$

Ce qui donne l'expression suivante pour la conductance critique de percolation :

$$G_c = \frac{e^2}{kT} U_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right]$$

$$D'où \quad \sigma = \frac{e^2}{kT} \frac{1}{\tilde{R}} U_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] \approx \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/4} \right] \quad \text{Eq IV-64}$$

Ce qui représente la loi de variation de la conductivité en fonction de la température ou la loi de Mott.

III - Conduction par hopping dans les métaux granulaires :

Régime diélectrique en présence d'un champ électrique faible :

Nous commencerons par définir les métaux granulaires et nous donnerons quelques notions sur leur nature.

III.1 - Généralités :

Les métaux granulaires sont des matériaux composés. Ils résultent de la dispersion de grains métalliques de dimensions diverses à l'intérieur d'un corps isolant. Les deux phases en présence métallique et isolante sont naturellement non miscibles. Ordinairement, ces matériaux connus sous le nom de « cermets » étaient utilisés comme résistances électriques en raison de leurs hautes résistivités et du faible coefficient de température de la résistivité (T.C.R). Les métaux granulaires sont préparés selon un certain nombre de méthodes différentes, dont nous citerons :

- l'évaporation ou la pulvérisation d'un métal oxydable en présence d'oxygène.
- la co-évaporation ou la co-pulvérisation de métaux et isolants non miscibles.
- L'implantation d'ions métalliques dans des corps isolants.

Une autre forme de métaux granulaires s'obtient au premier stade lors de la fabrication des couches minces métalliques par évaporation ; ils se présentent sous la forme de petits îlots métalliques baignant dans une mer isolante. Selon la prédominance de l'une ou de l'autre des deux phases, trois régimes distincts sont possibles : métallique, de transition, et diélectrique.

Ce dernier régime est celui que nous allons développer pour étudier la loi de la conductivité en fonction de la température pour des champs électriques faibles.

III.1.1 - Régime métallique :

La fraction, p , de volume métallique est assez grande de sorte que les grains métalliques forment un continuum métallique avec quelques inclusions diélectriques. Dans ce cas les phénomènes qui dépendent du transfert d'électrons sont conservés (ferromagnétisme- supraconductivité). La conduction se fait à travers le continuum métallique de la même façon qu'elle se ferait dans un métal ordinaire.

III.1.2 - Régime de transition :

Dans ce cas, les inclusions diélectriques sont plus nombreuses, la fraction p de volume métallique s'équilibre avec celle de l'isolant. Il y a inversion entre le régime métallique et le régime diélectrique. Les inclusions diélectriques présentent une structure en Labyrinthe, que finirait, si p diminue, par devenir un continuum diélectrique contenant des grains métalliques isolés.

La conductivité électrique dans cette région est due au phénomène de percolation à travers le labyrinthe métallique et à l'effet tunnel des électrons entre les grains isolés. La transition entre le régime métallique et le régime diélectrique se produit pour une valeur critique p_c de la fraction p de volume de métal appelée « Composition pour le seuil de percolation ».

En dessous de ce seuil seul l'effet tunnel intervient dans la conduction. A l'approche de ce seuil certaines propriétés (par exemple la conductivité) se trouvent brutalement modifiées.

Les résultats trouvés dans la troisième partie de notre travail aboutissaient à la

relation :
$$\sigma_L \propto (p - p_c)^\beta$$

où : σ_L représente la conductivité à faible champ et la fraction de volume critique du métal est donné par :

$P_c = 0,25$ par la théorie de percolation de liaisons pour un réseau à 3 dim.

$P_c = 0,33$ par la théorie du milieu effectif pour un réseau à 3 dimensions.

III.1.3 - Régime diélectrique :

Lorsque la fraction, p , de volume de métal devient inférieure à la valeur critique p_c , le régime diélectrique est atteint. La structure est à prédominance isolante avec quelques grains métalliques dispersés dans cette matrice. Dans cette région l'intérêt se porte sur les propriétés physiques de petites particules métalliques isolées. Ce qui se traduit surtout par un intérêt pour le phénomène de transport électronique par effet tunnel entre les particules isolées.

En physique de petites particules, métalliques isolées, deux quantités physiques jouent un rôle important :

Ce sont la différence δ entre les niveaux d'énergie électronique, à l'intérieur d'une particule métallique, due à la quantification du mouvement et surtout l'énergie d'activation E_c^{ij} mise en jeu lors d'un transfert d'électron entre deux grains neutres i et j . Il est évident qu'elle prend diverses valeurs selon que la distance R_{ij} séparant les deux grains est plus ou moins grande. On introduit deux valeurs limites E_c^0 et E_c^1 de cette énergie de charge E_c^{ij} . L'énergie E_c^0 serait l'énergie nécessaire à la création d'une paire de deux grains chargés, positivement et négativement, qui seraient complètement dissociés. L'énergie E_c^1 serait l'énergie mise en jeu pour la création d'une même paire de grains mais qui ne seraient pas dissociés complètement. Le premier cas, donnant E_c^0 est celui qui nous intéresse pour le moment.

En effet, notre but étant l'étude du hopping en régime diélectrique, il faut que l'électron n'ait plus de lien avec le grain qu'il vient de quitter ; les grains chargés doivent être complètement dissociés. D'autre part, il s'agit d'étudier la loi de la conductivité, à champ faible, en fonction de la température, pour cela il sera utile de caractériser l'échantillon sur lequel sera faite cette étude.

III.1-3.a - Caractéristiques du matériau :

Le métal granulaire correspond à une structure désordonnée qui se traduit par des valeurs complètement aléatoires de la dimension d des grains et de la distance de séparation R entre les grains. Ces deux grandeurs sont caractérisées par des probabilités de distribution.

Mais physiquement il est toujours possible de les prendre de telle sorte que leurs variations soient corrélées. Les hypothèses suivantes permettent facilement cette corrélation.

Il existe à l'intérieur du matériau des petites régions où les grains ont même dimension ; certaines régions contiennent des grains plus gros que d'autres, enfin à l'intérieur d'une région les grains sont plus ou moins séparés selon la grosseur des grains : les grains les plus gros sont plus éloignés les uns des autres que les plus petits. Ces hypothèses permettent de conclure que le rapport R/d est une caractéristique locale (c'est-à-dire d'une région) et partout dans cette région il est constant, $R/d = \text{constante}$.

Ainsi une région pourrait croître indéfiniment jusqu'à couvrir le système entièrement. La valeur du rapport R/d est différente pour chaque région ; celle qui va caractériser l'échantillon dépendra de la région qui s'étend sur tout le système. Ce rapport ne va dépendre que de la composition métallique de l'échantillon, c'est-à-dire de la fraction de volume p de métal qu'il contient.

Cette fraction de volume p de métal est reliée au rapport R/d par la considération suivante :

On suppose que le phénomène de conduction à l'intérieur du métal granulaire n'est pas modifié si ce matériau se présente sous la forme d'un réseau cubique simple de sphères métalliques ; la constante du réseau serait $R+d$, d étant le diamètre d'une sphère. Dans ces conditions $(R+d)^3$ contiendrait un volume métallique égal à $4 \pi d^3/3$ et par suite :

$$P = \frac{4\pi d^3 / 3}{(R + d)^3} = \frac{4\pi / 3}{\left(1 + \frac{R}{d}\right)^3}$$

d'où la relation entre R/d et p :

$$\frac{R}{d} = \left(\frac{4\pi}{3p}\right)^{1/3} - 1$$

Finalement, pour une composition p donnée ce rapport prend une valeur fixe, soit

$$P = \text{cste} \Rightarrow R/d = \text{cste}$$

D'autre part, d'après les travaux théorique de Miller et Shirn (19) ; Neugebauer et Webb (21), Neugebauer (20), Hill (18), montrèrent que la relation RE_c^0 est une constante et cette condition ne dépend que de la valeur du rapport R/d , donc de la composition de l'échantillon, $RE_c^0 = \text{cste}$ est une caractéristique importante du matériau.

III.1.3.b - Conductivité en régime diélectrique sous un champ électrique faible :

Il s'agit d'étudier la conductivité électrique, en régime diélectrique et en présence d'un champ électrique faible, dans un métal granulaire. Aux basses températures les seuls mécanismes de conduction susceptibles d'avoir lieu sont l'effet-tunnel et le hopping. Si la température est suffisamment basse le hopping est prédominant. La conductivité en courant continu d'un métal granulaire peut-être déduite d'un réseau de conductances G_{ij} aléatoires, connectant un grain métallique (i) à un autre grain métallique (j). Les conductances G_{ij} sont définies par les taux de transition U_{ij} entre les sites i et j :

$$U_{ij} = U_0 \exp\left[-2 \alpha R_{ij} - \frac{E_c^{ij}}{2kT}\right]$$

Avec R_{ij} étant la distance séparant les surfaces des grains le long d'une ligne passant par leur centre, E_c^{ij} étant l'énergie d'activation mise en jeu lors du transfert de l'électron du grains neutre (i) au grain neutre (j).

Dans la théorie de la conductance critique de percolation, la conductivité du réseau de résistances aléatoires équivalent peut être écrite sous la forme :

$$\sigma(T) = \sigma_0 e^{-S_p}$$

avec $\sigma(T)$ proportionnelle à la conductance critique de percolation G_c .

D'autre part nous avons établi l'existence d'un seuil de conduction (ou condition d'appartenance au réseau critique pour les conductances) tel que $G_{ij} \geq G_c$, que nous écrivons dans le cas présent :

$$2\alpha R + \frac{\beta}{2} E_c^0 \leq S_p \quad \text{Eq IV- 65}$$

La résolution de ce problème nécessite l'introduction de la notion de fraction de volume critique dont nous rappellerons la définition : c'est le volume fractionnaire minimum accessible aux électrons par hopping à partir des différents sites du système de sorte qu'un chemin infiniment long de conductances connectées $G_{ij} \geq G_c$ existe.

Nous avons cité auparavant les deux relations suivantes :

$$2\alpha R + \frac{\beta}{2} E_c^0 \leq S_p \quad \text{et} \quad RE_c^0 = cste = f \quad \text{Eq IV-66.}$$

Ces deux relations traduisent respectivement le seuil de percolation et une valeur caractéristique du matériau. En les combinant nous avons l'inéquation :

$$2\alpha R^2 - S_p R + \frac{\beta}{2} f \leq 0$$

Dont les solutions sont données par : $R_- \leq R \leq R_+$

$$R_{\pm} = \frac{1}{4\alpha} \left[S_p \pm (S_p^2 - 4\alpha\beta f)^{1/2} \right]$$

Avec :

$$S_p^2 \geq 4\alpha\beta f.$$

Eq IV-67

Les deux inégalités sur R et S_p sont l'équivalent de la condition d'appartenance au réseau critique, mais pour les métaux granulaires. De plus, les inégalités sur R impliquent qu'étant donné un grain centré sur l'origine, un grain du proche voisinage, situé sur la coquille d'épaisseur $(R_+)-(R_-)$ serait accessible par hopping à partir du grain origine.

Soit $p(R) dR$ la probabilité pour que le plus proche voisin du grain situé en $R=0$ soit dans un élément dR situé à une distance R ; les grains sont supposés répartis dans un milieu diélectrique de dimension D .

Par conséquent la fraction de volume effectif p_e sera proportionnelle à la probabilité pour que R soit compris entre R_- et R_+ , à savoir :

$$p_e \propto \int_{R_-}^{R_+} p(R) dR \quad \text{Eq. IV-68}$$

Appelons $V_D(R)$ le volume de l'hypersphère de rayon R dans un référentiel de dimension D , il aura pour valeur, selon le cas :

$$V_D(R) = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \cdot \frac{R^D}{D} \quad \text{Eq. IV-69}$$

Soit $V_1(R) = 2R$; $V_2(R) = \pi R^2$; $V_3(R) = \frac{4}{3}\pi R^3$

La différence $V_D(R_+) - V_D(R_-)$ indique le volume de la coquille comprise entre R_- et R_+ . Il est donc naturel que p_e soit proportionnelle à ce volume :

$$p_e \propto V_D(R_+) - V_D(R_-) \quad \text{Eq IV-70}$$

Finalement, la fraction de volume effectif p_e est une grandeur macroscopique, elle sera évidemment proportionnelle à la densité de grains métalliques $n = \frac{N}{V}$ dans le milieu diélectrique.

L'expression globale de p_e s'écrira donc :

$$P_e = \frac{N}{V} [V_D(R_+) - V_D(R-)] \int_{R-}^{R+} p(R) dR \quad \text{Eq IV-71}$$

Nous remarquons que p_e est le produit de la densité n de grains et de la quantité :

$$P_a = [V_D(R_+) - V_D(R-)] \int_{R-}^{R+} p(R) dR \quad \text{Eq IV-72}$$

qui est donc une grandeur microscopique donnant la fraction de volume accessible à l'électron par saut à partir d'un site de référence. Elle se définit par le volume de la région dans laquelle un site, (plus proche voisin du site de référence) accessible peut se trouver, (c'est à dire connecté au site de référence par une conductance $G_{ij} \geq G_c$) avec une probabilité de trouver les plus proches voisins dans cette région. Nous pouvons alors écrire :

$$p_e = n p_a \quad \text{Eq IV-73}$$

L'approche de la percolation dans le réseau équivalent est caractérisée par une fraction de volume critique $P_c = \frac{V_c}{V} = P_e$ de sorte que, lorsque la fraction de volume totale accessible par hopping dépasse P_c , un amas infini de conductances connectées existe à l'intérieur du sous-ensemble de sites défini par la condition d'appartenance au réseau critique.

Finalement :

$$P_c = P_e = n [V_D(R_+) - V_D(R-)] \int_{R-}^{R+} p(R) dR \quad \text{Eq IV-74}$$

Les valeurs de P_C ont été étudiées dans la troisième partie de notre travail.

Nous avons trouvé les résultats suivants :

$P_C = 0,25$ par la théorie de percolation de liaisons pour des réseaux à 3 dimensions,

$P_C = 0,33$ par la théorie du milieu effectif pour des réseaux à 3 dimensions.

- Passons maintenant au calcul de la quantité $p(R) dR$ / Dans le cas de particules ponctuelles, ce que nous supposons vrai dans notre cas, les positions ne sont pas corrélées, et la densité de probabilité $p(R)$ est exprimée de la façon suivante ; $p(R) dR$ est proportionnel à :

- L'élément de volume accessible $dV_D(R)$ situé sur la fraction de volume contenant le plus proche voisin.

- La fraction de volume ne contenant pas le plus proche voisin, en tenant compte de nombreux choix de ce dernier,

- la densité de grains métalliques.

Ainsi nous aurons :

$$\begin{aligned} p(R)dR &= \lim_{N \rightarrow \infty} n \cdot dV_D(R) \left[1 - \frac{V_D(R)}{V} \right]^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} d[n \cdot V_D(R)] \left[1 - \frac{nV_D(R)}{N} \right]^N \\ &= d[n \cdot V_D(R)] \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{nV_D(R)}{N} \right]^N \end{aligned}$$

$$p(R) dR = d[nV_D(R)] (1 - nV_D(R) + n^2V_D(R) + \dots)$$

soit :

$$p(R) dR \simeq d[nV_D(R)] \exp[-nV_D(R)] \quad \text{Eq IV -75}$$

où l'utilisation de la limite sur N (et V) tendant vers l'infini permet de prendre la probabilité globale l'échantillon considéré ; mais cette limite ne porte pas sur la densité de grains n qui est une grandeur macroscopique constante. A partir de cette

probabilité pour des grains d'une grosseur donnée, la fraction de volume critique s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 Pc &= n[V_D(R+) - V_D(R-)] \int_{R-}^{R+} p(R) dR \\
 &= n[V_D(R+) - V_D(R-)] \int_{R-}^{R+} d[nV_D(R)] \exp[-nV_D(R)] \\
 &= n[V_D(R+) - V_D(R-)] [-\exp\{-nV_D(R)\}]_{R-}^{R+} \\
 &= n[V_D(R+) - V_D(R-)] \{ \exp[-nV_D(R-)] - \exp[-nV_D(R+)] \}
 \end{aligned}$$

Ceci peut être explicité davantage :

$$Pc = n \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)D} [R_+^D - R_-^D] \left\{ \exp\left(-n \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)D} R_-^D\right) - \exp\left(-n \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)D} R_+^D\right) \right\}$$

soit en posant :

$$W_D = \frac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)D}$$

$$Pc = nW_D [R_+^D - R_-^D] \left\{ e^{-nw_D R_-^D} - e^{-nw_D R_+^D} \right\} \text{ Eq IV-76}$$

examinons maintenant la relation entre les variations de p_c et celles de S_p .

$$R_-^+ = \frac{1}{4\alpha} [S_p \pm (S_p^2 - 4\alpha\beta f)^{1/2}]$$

Nous avons :

$$S_p^2 \geq 4\alpha\beta f$$

$$\text{Si } S_p^2 = 4\alpha\beta f \Rightarrow R_-^+ = \frac{Sp}{4\alpha}; p_c = 0$$

$$\text{Si } S_p^2 \gg 4\alpha\beta f \Rightarrow R_+ = \frac{Sp}{2\alpha}; R_- = 0; P_c = -nW_D \left(\frac{Sp}{2\alpha} \right)^D \left\{ e^{-nW_D \left(\frac{Sp}{2\alpha} \right)^D} - 1 \right\}$$

Nous notons, alors, que p_c passe de la valeur zéro à sa valeur maximale lorsque le

$$\text{couple } (R_+, R_-) \text{ passe de } \left(\frac{Sp}{4\alpha}, \frac{Sp}{4\alpha} \right) \text{ à } \left(\frac{Sp}{2\alpha}, 0 \right)$$

Conformément à ces variations et à la condition $Sp^2 \geq 4\alpha\beta f$, nous sommes amenés à poser :

$$Sp^2 = 4\alpha\beta f + g \quad \text{Eq IV-77}$$

où g doit être une fonction positive, de valeur quelconque pour l'instant. Mais si nous reprenons la définition de la fraction de volume critique P_c qui est la valeur critique, de la fraction de volume accessible, à partir de laquelle la conduction s'établit; nous pouvons conclure qu'il sera d'autant plus facile d'avoir une conduction que cette valeur P_c est petite par conséquent la valeur de g doit répondre à ce critère.

Il faut donc que la fonction g soit très petite devant la quantité $4\alpha\beta f$ nous introduisons un paramètre η choisi de façon à ce que $\eta/2$ soit largement inférieur à

$$\text{l'unité : } \frac{\eta}{2} \ll 1 \Rightarrow \frac{\eta}{2} 4\alpha\beta f \ll 4\alpha\beta f$$

$$\text{Nous posons : } g = \frac{\eta}{2} 4\alpha\beta f = \frac{\eta}{2} \frac{4\alpha f}{kT} = \frac{\eta}{2} \frac{T_0}{T} \ll \frac{T_0}{T} \quad \text{Eq IV-78}$$

$$\text{Avec : } T_0 = \frac{4\alpha f}{k}$$

Et finalement :

$$S_p^2 = \frac{T_0}{T} + g = \frac{T_0}{T} \left(1 + \frac{\eta}{2} \right) \quad \text{EqIV-79}$$

Il devient clair que, du moment que T est une variable, les expressions (Eq. IV-78) et (Eq. IV-79) ne seront vérifiées que dans certains intervalles de températures, il en sera de même pour la loi de variation de la conductivité en fonction de la température .

$$\begin{aligned} \sigma(T) &= \sigma_0 e^{-S_p} = \sigma_0 \exp \left[- \left\{ \frac{T_0}{T} \left(1 + \frac{\eta}{2} \right) \right\}^{1/2} \right] \\ &= \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \left(1 + \frac{\eta}{2} \right)^{1/2} \right] \\ &= \sigma_0 \exp \left[\left(1 + \frac{\eta}{4} \right) \left(- \sqrt{\frac{T_0}{T}} \right) \right] \end{aligned}$$

et comme $\frac{\eta}{4} \ll 1$, nous aurons finalement :

$$\sigma(T) \approx \sigma_0 \exp \left[- \left(\frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \right] \quad \text{Eq IV-80.}$$

En résumé, nous venons de déterminer l'expression donnant la conductivité électrique d'un métal granulaire, en régime diélectrique et en présence d'un champ électrique faible.

Dans ces calculs nous ne sommes pas préoccupés de la dimension du système, et la loi est donc valable pour D quelconque. De plus cette loi ne sera valable que sur des marges de températures données et cela selon les corps et leur composition ; ce fait étant dû à la condition sur η .

**CONCLUSION
GENERALE**

Conclusion générale

L'étude de la conductivité dans les milieux inhomogènes nous a permis d'aboutir à quelques résultats théoriques qui sont en bon accord avec l'expérience et peuvent être donc considérés comme une bonne description des faits expérimentaux. Ces résultats se résument comme suit :

1°) Dans le cas d'un milieu inhomogène constitué de deux phases ayant des formes quelconques, nous avons constaté que la constante diélectrique effective prenait une valeur indéterminée, et elle varie toujours entre deux limites fixes imposées par la fonction caractéristique géométrique qui représente un outil mathématique très efficace pour l'étude des propriétés électriques et magnétiques des systèmes inhomogènes. Nous avons aussi remarqué que cette indétermination était liée nécessairement aux propriétés de la situation physique, résultant du fait que généralement nous n'avons aucune information sur la distribution spatiale des phases ainsi que sur la forme des régions composants le matériau.

Nous pensons que cette indétermination ne peut être réduite sans informations physiques supplémentaires.

2°) Nous avons essayé de lever cette indétermination en considérant un milieu inhomogène à deux phases ayant des formes sphériques.

Par l'application de l'approximation du milieu effectif (A.M.E) à une seule liaison, nous avons pu déterminer une valeur exacte de la conductivité électrique effective, ce résultat coïncide avec celui obtenu auparavant par Landauer.

3°) La probabilité de percolation est utilisée dans les phénomènes de transport et ceci pour la détermination du seuil de percolation à partir duquel il peut y avoir conduction. Mais la forme de la fonction conductivité au-delà de ce seuil ne peut pas être tirée de $P(p)$ seulement, puisque la probabilité de percolation à une pente infinie au voisinage du seuil de percolation, tandis que la fonction conductivité en a une pente nulle.

Ceci nous a conduit à l'introduction d'une autre fonction appelée percolation conductance, " $G(p)$ "; qui paraît être utile pour décrire les phénomènes de

transport se déroulant à l'intérieur des milieux inhomogènes présentant des seuils de percolation.

La détermination de la conductivité à partir de la percolation conductance, "G(p)" ; semble être une méthode numérique ennuyeuse, car elle utilise une technique numérique qui demande beaucoup de moyens expérimentaux.

Pour cela, nous avons pensé utile d'introduire l'approximation analytique du milieu effectif (A.M.E) pour le modèle de percolation de liaison qui représente une méthode analytique efficace qui nous permet de prévoir une bonne description des phénomènes de transport se déroulant à l'intérieur des systèmes présentant des transitions de phases.

4°) Nous avons étudié la conductivité d'un système à deux phases en fonction de la fraction du volume conducteur.

Le phénomène de conduction par saut qui se produit aux basses températures pour les systèmes cristallins et amorphes. Ce phénomène se rencontre également dans les systèmes granulaires aussi bien pour des températures élevées que pour des températures basses.

Nous avons déterminé l'expression de la conductivité électrique d'un métal granulaire.

**REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES**

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Handbook of fillers and reinforcements for plastics, Edited by Harry S. Katz and J.V. Milewski, Published by Van Nostrand Reinhold Company, New York 1978.
- [2] C. Calberg, S. Blacher, F. Gubbels, F. Brouers, R. Deltour, R. Jérôme, Electrical and dielectric properties of carbon black filled co-continuous two-phase polymer blends, *J. Phys. D:Appl. Phys.* **32** (1999), pp.1517-1525.
- [3] In-Gann Chen, W.B. Johnson, Alternating-current electrical properties of random metal-insulator composites, *Journal of Materials Science* **26**, (1991), pp 1565-1567.
- [4] A.J. Stoyanov, B.F. Howell, E.C. Fischer, H. Überall, K. Chouffani, Effective medium model dependence of radar reflectivity of conducting particle films, *Journal of Applied Physics* **86** (6), (1999), pp. 3110-3119.
- [5] M.J. Abdullah, D.K. Das-Gupta, Electrical properties of ceramic/polymer composites, *IEEE Trans. Electr. Insul.* **25** (3), (June 1990), pp. 605-610.
- [6] P. Calame, A. Birman, Y. Carmel, D. Gershon, B. Levush, A.A. Sorokin, V.E. Semenov, D. Dadon, L.P. Martin, M. Rosen, A dielectric mixing law for porous ceramics based on fractal boundaries, *J. Appl. Phys.* **80** (7), (1 October 1996), pp. 3992-4000.
- [7] R.W. Cohen, G.D. Cody, M.D. Coutts, B. Abeles, Optical properties of granular silver and gold, *Films, Phys. Rev.* **8**, (1973), pp.3689-3701.
- [8] R.E. Collin, *Field theory of guided waves*, (McGraw-Hill, New York, 1960), Chap. 12.
- [9] A. Priou, *Dielectric properties of heterogeneous materials: A.H. Shivola and I.V. Lindell – Polarizability modeling of heterogeneous media*, *Progress in Electromagnetics Research*, Elsevier, New York 1992.
- [10] A. von Hippel, *Dielectrics and waves*, (Artech House, Boston London 1995).
- [11] A. Chelkowski, *Fizyka dielektrykow*, PWN, Warszawa 1993.
- [12] B. Hilczer, *Elektrety i piezopolimery*, PWN, Warszawa, 1992.
- [13] R. Fournié, *Diélectriques: bases théoriques*, *Technique de l'ingénieur (D2 I)*, D213.
- [14] A. Beroual, *Matériaux pour le génie électrique, cours de DEA de génie électrique*, Ecole Centrale de Lyon, France, 1996.
- [15] J.C. Mage, *Origine des pertes dans les matériaux*, *RGE*, N°7 (Juin 1991), p.24.
- [16] S. Berthier, *Optique des milieux composites*, Polytechnica, Paris 1993.

- [17] H.A. Lorentz, Über die Beziehung zwischender Fortpflanzungs-geschwindigkeit des Lichtes unter Körperdichte, *Annalen der Physik und Chemie* **9**, (1880), pp. 641-665.
- [18] L. Onsager, Electric moments of molecules in liquids, *J. Am. Chem. Soc.* **58**, (1936), pp. 1486-1493.
- [19] J.G. Kirkwood, The dielectric polarisation of dielectric liquids, *J. Chem. Phys.* **7**, (1939), pp. 911-919 (1939)
- [20] H. Fröhlich, *Theory of Dielectric Constant and Dielectric Loss*, Oxford: Clarendon, 1958.
- [21] O.F. Mossotti, 1850, Discussione analitica sull influenza che l'azione di un mezzo dielettrico ha sulla distribuzione dell'ellettrica alla superficie di più corpi elettici disseminati in esso, *Mem. Math. Fisica Modena* **24**, pp. 49-74.
- [22] R. Clausius, 1879, *Die Mechanische Behandlung der Elektrizität*. Vieweg, *Die Mechanische Wärtheorie*, Vol.2, Braunschweig, pp.62-97.
- [23] M.T. Prinkey, A. Lakhtakia, B. Shanker, On the extended Maxwell-Garnett and the Extended Bruggeman approaches for dielectric-in-dielctric composites, *Optik* **96** No. 1, (1994), pp. 25-30.
- [24] J.C. Maxwell Garnett, , Colours in metal glasses and in metallic films, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A* **203**, (1904), pp. 38-420.
- [25] B. Michel, A. Lakhtakia, On the application of the strong property fluctuation theory for homogenizing chiral-in-chiral composites, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **29** (1996) pp.1431-1440.
- [26] Robert W Boydy, Russell J Gehry, George L Fischery and J E Sipez, Nonlinear optical properties of nanocomposite materials, *Pure Appl. Opt.* **5**, (1996), pp. 505-512. Printed in the UK
- [27] D.A.G. Bruggeman, Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von Substanzen. I. Dielektrizitätskonstanten und Leitfaähigkeiten der Mischkörper aus isotropen Substanzen, *Annalen der Physik (Leipzig)* **24**, (1935), pp. 636-679.
- [28] C. Pecharromàn, J.E. Iglesias, Effective dielectric properties of packed mixtures of insulator particles, *Physical Review B* **49** (11), (1994), The American Physical Society.
- [29] H. Fricke, A mathematical treatement of the electrical conductivity and capacity of disperse systems I, *Phys. Review* **24**, (1924), pp.575-587.
- [30] H. Fricke, A mathematical treatement of the electrical conductivity and capacity of disperse systems II, *Phys. Review*, **26**, (1926), pp. 687-681.

- [31] C.J.F. Böttcher, Theory of Electric Polarization, Elsevier Science Publishing Co., Amsterdam, 1952.
- [32] H. Looyenga, Dielectric constants of heterogeneous mixtures, *Physica* **31**, (1965), pp. 401-406.
- [33] L.D. Landau, E.M. Lifschitz, Course of Theoretical Physics, Pergamon Press, Oxford, 1960.
- [34] P.S. Neelakanta, Handbook of Electromagnetic Materials. Monolithic and Composite Versions and their Applications, Florida Atlantic University, Boca Raton, Florida, 1995.
- [35] Bergman D. J. and Stroud D., Physical Properties of Macroscopically Inhomogeneous Media, *Solid State Physics* **46**, (1992), pp. 147-269.
- [36] K. Lichtenecker, Mischkörpertheori als Wahrscheinlichkeitsproblem, *Phys. Zeitsch*, vol. **30**, 1929, pp. 805-809.
- [37] K. Lichtenecker, K. Rother, Die Herleitung des logarithmischen Mischungesetzes aus allgemeinen Prinzipien der stationären Strömung, *Phys. Zeitsch*, vol. **32**, (1938), pp. 255-260.
- [38] W.F. Brown, Dielectrics, in *Encyclopedia in Physics V-XVII*, Springer-Verlag, Berlin 1956.
- [39] L.K.H. van Beek, Dielectric behaviour of heterogeneous systems, in *Progress in Dielectrics*, vol. **7** (J.B. Birks, Ed.), (CRC Press leveland) 1987.
- [40] L. Lorenz, Über die Refractionsconstante, *Ann. Phys. (Leipzig)*, vol. **11**, (1880), pp. 70-103.
- [41] Lord Rayleigh, On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium, *Phil. Mag.*, vol. **34**, (1892), pp. 481-502.
- [42] R.E. Meredith, C.W. Tobias, *Advances Electrical and Electronic Engineering*, vol. II, (Wiley Interscience), New York 1962.
- [43] O. Wiener, Die Theori des Mischkörpers für das Feld des stationären Strömung, *Abhdl. D. kgl. Akad. D. Wiss. Leipzig*, vol. **32**, (1912), pp. 509-604.
- [44] R.W. Sillars, Properties of dielectric containing semi-conducting particles of various shapes, *J. Inst. Elect. Engr.*, vol. **80**, (1937), pp. 378-392.
- [45] D. Polder, J.H. Van Santen, The effective permeability of mxtures of solids, *Physica*, vol. **12**, (1946), pp. 257-271.
- [46] L. Lewin, The electrical constant of a material loaded with spherical particles, *J. IEEE part III*, vol. **94**, (1947), pp. 65-68.

- [47] B.V. Hamon, Maxwell-Wagner loss and absorption currents in dielectrics, *Aust. J. Phys.*, vol. 6, (1953), pp. 305-315.
- [48] C. Boned, J. Peyrelasse, Some comments on the complex permittivity of ellipsoid dispersed in continuum media, *J. Phys. D.*, vol. 16, (1983), pp. 1777-1786.
- [49] A.H. Shivola, J.A. Kong, Affective permittivity of dielectric mixtures, *IEEE Trans. Geoscience Remote Sensing*, vol. 26 (4), (1988), pp. 420-429.
- [50] C. Grosse et J.L. Greffe, Permittivité Statiques des Emulsions, *Journ. Chim. Phys.*, 76 (4), (1979), p. 305.
- [51] S. Kisdnasamy, P.S. Neelakantaswamy, Complex permittivity of a dielectric mixture, Modified Fricke's formula based on logarithmic law of mixing, *Electron Letts.* vol. 20, (1984), pp. 291-293.
- [52] E. Guyon, La physique de la matière hétérogène, *Pour la Science*, Oct. (1982), p.14.
- [53] S.R. Broadbent, J. M. Hammersley, Percolation processes I. Crystals and mazes, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 53, (1957), pp. 629-641.
- [54] P.G. de Gennes, La percolation : un concept unificateur, *La Recherche N°72*, Nov. (1975), p. 919.
- [55] David S. McLachlan, Michael Blaszkiewicz, Robert E. Newnham, Electrical resistivity of composites, *J. Am. Ceram. Soc.*, 73 (8), (1990), pp. 2187-2203.
- [56] H. Ottavi, J. Clerc, G. Giraud, J. Roussenq, E. Guyon, C.D. Mitescu, Electrical conductivity of a mixture of conducting and insulating spheres: an application of some percolation concepts, *J. Phys. C: Solide State Physics*, vol. 11, (1978), pp. 1311-1328.
- [57] D.S. McLachlan, The complex permittivity of emulsions: an effective media-percolation equation, *Solide State Communications*, 72 (8), (1989), pp. 831-834.
- [58] R. Landauer, Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous media, *American Institute of Physics*, No. 40, 2 (1978)
- [59] D.J. Bergman, Y. Imry, *Phys. Rev. Lett.* 39, (1977), p.1222.
- [60] M. Grannan, J.C. Garland, D.B. Tanner, *Phys. Rev. Lett.* 46, (1981), 375.
- [61] R. Coelho, B. Aldenize, *Les diélectriques: propriétés diélectriques des matériaux isolants*, Ed. Hermès (1993).
- [62] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, 2nd ed. (Taylor & Francis, London, 1992)

- [63] Junjie Wu, D.S. McLachlan, Scaling behavior of the complex conductivity of graphite-boron nitride percolation system, *Phys. Rev. B*, **58** (22), p.58.
- [64] A. Shivola, J.A. Kong, Effective permittivity of dielectric mixtures, Proceedings of the International URSI Commission F Symposium, paper 4.6, Durham, New Hampshire, USA, July 28 – August 1, 1986.
- [65] A. Shivola, Dielectric properties of mixtures with inhomogeneous scatterers: application to rain and hail modeling, Proceedings of the International Geoscience and Remote Sensing Symposium IGARSS '87, 1027-31, Ann Arbor, Michigan, USA, May 18-21, 1987
- [66] A. Shivola, Effective permittivity of multiphase mixtures: The scatterer as a two-layer sphere, Helsinki University of Technology, Report 19, Electromagnetics Laboratory, 1987.
- [67] A. Shivola, I.V. Lindell, Transmission line analogy for calculating the effective permittivity of mixtures with spherical multilayer scatterers, *Journal of electromagnetic waves and applications*, vol. **3** (8), 1988, pp. 741-756.
- [68] P.A. Steeman, F.H.J. Maurer, An interlayer model for the complex dielectric constant of composites: An extension to ellipsoidally shaped particles, *Colloid and Polymer Science*, Vol. **270**, No. 11 (1992), pp. 1069-1079.
- [69] P.A.M. Steeman, F.H.J. Maurer, An interlayer model for the complex dielectric constant of composites, *Colloid and Polymer Science*, Vol. **268**, (1990), pp. 315-325.
- [70] M. El Feddi, Z. Ren, A. Razeq, A. Bossavit, Homogenisation technique for Maxwell Equations in periodic structures, *IEEE Trans. Magnét.* Vol. **33** (2), March (1997), pp. 1382-1385.
- [71] K.K. Kärkkäinen, A.H. Shivola, K.I. Nikoskinen, Effective permittivity of mixtures: validation by FDTD method, *IEEE Trans. on Geoscience and Remote Sensing*, vol. **38** (3) May (2000), pp. 1303-1308.
- [72] P.K. Gosh, M.E. Azimi, Numerical Calculation of Effective Permittivity of Lossless Dielectric Mixtures using Boundary Integral Equation, *IEEE Trans. Diel. and EI*, vol. **1** (6), Dec. (1994), pp. 975-981.
- [73] M. Spasojevic, P.L. Levin, On Adaptive Refinement for Boundary Integral Methods in Electrostatics, *IEEE Trans. Diel. and EI*, Vol. **1** (6), Dec. (1994), pp. 963-973.
- [74] R. Tao, Z. Chen, P. Sheng, First-principles Fourier approach for the calculation of the effective dielectric constant of periodic composites, *Phys. Rev. B*, vol. **41** (4), Feb. (1990), pp. 2417-2420.

- [75] L.C. Shen, C. Liu, J. Korringa, K.J. Dunn, Computation of conductivity and dielectric constant of periodic porous media, *J. Appl. Phys.* **67** (11), June (1990), pp. 7071-7081.
- [76] B.E. Barrowes, Chi O. AO, F.L. Teixeira, J.A. Kong, L. Tsang, Monte Carlo Simulation of Electromagnetic Wave Propagation in Dense Random Media with Dielectric Spheroids, *IEICE Trans. Electron.*, vol. E83-C (12) Dec. (2000), pp.1797-1802.
- [77] A. Boudida, A. Beroual, C. Brosseau: How Shape Anisotropy Affects the Permittivity of Lossy Heterostructures?, *CEIDP '98, Atlanta, USA, Oct. (1998)*, pp. 261-264.
- [78] C.C. Brosseau, A. Beroual, A. Boudida, How do shape anisotropy and spatial orientation of the constituents affect the permittivity of dielectric heterostructures?, *Journal of Applied Physics* **88** (12), pp. 7278-7288.
- [79] Sareni B., Krähenbühl L., Beroual A., Brosseau C., 1 August 1996, Effective dielectric constant of periodic composite materials, *J. Appl. Phys.* **80** (3), pp. 1688-1696
- [80] R. Sikora, *Teoria pola elektromagnetycznego*, WNT, Warszawa, 1997
- [81] B.M. Jaworski, A.A. Dietlaf, *Poradnik Encyklopedyczny: Fizyka*, PWN, Warszawa 2000
- [82] I.N. Bronsztejn, K.A. Siemiendajew, *Poradnik encyklopedyczny: Matematyka*, PWN, Warszawa 1999
- [83] W. Michalski, R. Nowicki, *Zbior zagadnien i zadan z teorii pola eletromagnetycznego*, PWr., Wroclaw, 1995
- [84] A. Krawczyk, *Podstawy elektromagnetyzmu matematycznego*, INBZT, Warszawa 2001
- [85] Z. Flisowski, *Technika wysokich napiec*, WNT, Warszawa 1999
- [86] A.Boudida, *Caracterisation diélectrique des matériaux composites: influence de l'anisotropie de forme et d'orientation*, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, France, 1999
- [87] R. Courant, Variational methods for solution of problems of equilibrium and vibrations, *Bull. Amer. Math. Soc.* **49**, (1943), pp. 1-23.
- [88] P. Silvester, *Finite elements for electrical engineers*, Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [89] P. Hunter, A. Pullan, *FEM/BEM Notes*, The University of Auckland - Department of Engineering Science, New Zealand 2001
- [90] J.C. Sabonnadière, J.L. Coulomb, *Calcul ds champs électromagnétiques*, Techniques de l'ingénieur, D3020.

- [91] C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, *The Finite Element Method*, vol. 1 (Mc Graw-Hill, London 1989).
- [92] L. Krähenbühl, *La méthode des équations intégrales de frontière pour la résolution de problèmes de potentiel en électrotechnique et sa formulation axisymétrique*, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, France, 1983
- [93] C.A. Brebbia, *The boundary element method for engineers*, (Pentech Press, London 1980).
- [94] J. C. Wu, *Boundary element methods and inhomogeneous parabolic equations*, in C. A. Brebbia & B. J. Noye, eds, 'BETECH 85', Springer-Verlag, pp. 19-30 (1985).
- [95] B. Nettelblad and G.A. Niklasson, *On the low frequency permittivity of liquid-filled porous media*, *Solid State Comm.*, Vol.90, pp. 201-204, 1994
- [96] B. Nettelblad and G.A. Niklasson, *Extension of the grain consolidation model to account for interface effects*, *Proc. DRP'94, Dielectric and Related phenomena (Cracow - Institute of Technology, Zakopane, Poland)*, pp. 95-98, 1994.
- [97] Yee, K.S., *Numerical Solution of Initial Boundary Value Problems Involving Maxwell's Equations in Isotropic Media*, *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, vol. 14, (1966), pp. 302-307.
- [98] S. Ulam, *Adventures of a Mathematician*, New York 1976.
- [99] Polska Norma PN-86/E-04403 (conforme avec IEC Publication 250, 1969), *Materialy elektroizolacyjne stale. Metody pomiaru ϵ i $\text{tg}\delta$* , Polski Komitet Normalizacji, Miar i Jakości, Wydawnictwa Normalizacyjne „Alfa”, 1987 Warszawa.
- [100] W. Krolkowski, Z. Klosowska-Wolkowicz, P. Penczek, *Zywice i laminaty poliestrowe*, WNT, Warszawa 1986.
- [101] Z. Bojer, Z. Hertz, P. Penczek, *Zywice epoksydowe*, WNT, Warszawa 1982.
- [102] PN-84/E-04409: *Materialy elektroizolacyjne ciekle. Pomiary współczynnika strat dielektrycznych, przenikalności elektrycznej względnej i rezystywności.* (IEC Publikacja 247, 1978: *Measurement of relative permittivity, dielectric dissipation factor and d.c. resistivity of insulating liquids.*)
- [103] O.H. Wyatt, D. Dew-Hughes, *Wprowadzenie do inżynierii materiałowej. Metale, ceramika i tworzywa sztuczne*, WNT, Warszawa 1978.
- [104] Mantese J. V., Micheli A. L., Dungan D. F., Geyer R. G., Baker-Javis J., Grosvenor J., *Applicability of effective medium theory to ferroelectric/ferrimagnetic composites with composition and frequency-dependent complex permittivities and permeabilities*, *J. Appl. Phys.* 79 (3), p.1655-1660, 1 February 1996.

- [105] Frost N. E., McGrath P. B., Burns C. W., Nancy E. Frost et al., Effect of Fillers on the Dielectric Properties of Polymers, Conference Record of the 1996 IEEE International Symposium on Electrical Insulation, pp. 300-303, Montreal, Quebec, Canada, June 16-19, 1996.
- [106] Ceramic Industry Materials Handbook, Ceramic Industry, editor: Laurel Sheppard, publisher: Myra Smitley, Troy, Michigan, January 1997.
- [107] M. Salah Khalil, The Role of BaTiO₃ in Modifying the dc Breakdown Strength of LDPE, IEEE Trans. Dielect. And Electr. Ins., Vol. 7 No. 2, pp. 261-268, April 2000.
- [108] Polska Norma PN-89/E-06307 (conforme avec: IEC 672-2, 1980: Specification for ceramic and glass insulating materials. Methods of tests.), Elektroizolacyjne materialy ceramiczne. Metody badan, Polski Komitet Normalizacji, Miar i Jakosci, Wydawnictwa Normalizacyjne „Alfa”, 1989 Warszawa.
- [109] Nekrasov M. M. and Poplavko Yu. M., Investigation of the dispersion of the dielectric constant of barium titanate type ferroelectrics in the microwave region, Bulletin of the Academy of Sciences of USSR, Physical Series 28 (4), pp. 621-623, 1964.
- [110] D. Hiltbrunner, T. Strozzi, Ch. Mätzler, A. Standley, Identification of electromagnetic signatures and data gaps of snow related to microwave and optical measurements - WP 310, Version 1.0, 29 January 1997, Contract no.: ENV4-CT96-0304, An Environment and Climate project supported by the Commission of the European Community.
- [111] A. Shivola, Macroscopic permittivity of dielectric mixtures with application to microwave attenuation of rain and hail, IEE Proceedings, Part H, 136 (1), 24-28, February 1989.
- [112] H. Janssen, J.M. Seifert, H.C. Kärner, Interfacial phenomena in composite high voltage insulation, , IEEE Transaction on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol.6, No.5, October 1999, pp. 651-659.
- [113] J. Fleszynski, Z. Pohl, J.G. Wankowicz, S.M. Gubanski, J. Stankiewicz, J. Winkler, Experience with application of polymeric materials to outdoor high-voltage insulators in Poland, CIGRE Session, Paris 1998, ref. 15-301.
- [114] R. Hackam, Outdoor HV Composite Polymeric Insulators, IEEE Transaction on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol.6, No.5, October 1999, pp. 557-585.

- [115] T. Kikuchi, S. Nishimura, M. Nagao, K. Izumi, Y. Kubota, M. Sakata, Survey on the use of non-ceramic composite insulators, IEEE Transaction on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol.6, No.5, October 1999, pp. 548-556.
- [116] A. de la O, R.S. Gorur, Flashover of contaminated nonceramic outdoors insulators in a wet atmosphere, IEEE Transaction on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol. 5, No.6, October 1998, pp. 814-823.
- [117] R. Gorur, Developing an accelerated ageing test for composite polymer insulators: challenges and possible approach, Testing, INMR, November/December 2000.
- [118] J. Fleszynski, Metoda badania i oceny pretow S-E rdzeni izolatorow kompozytowych, Przegląd Elektrotechniczny, R. LXXVI 12/2000, str. 300-302.
- [119] IEC 61109, Composite insulators for a.c. overhead lines with a nominal voltage grater than 1000V. Definitions, test methods and acceptance criteria, 1992.
- [120] ISO 62-1980, Plastics. Determination of water absorption. (PN-81/C-89032, Tworzywa sztuczne. Oznaczanie chlonnosci wody.
- [121] ACHBY, M.F.and JONES, D.R.H; Matériaux, Dunod, Paris,1991.
- [122] The structure and Properties of Materials, 4 vol.Ed.WULFF, J; WILEY & Sons, New York, 1967.
- [123] CALLISTER, W.D. Jr, Materials Science and Engineering.An Introduction, WILEY & Sons, New York, 2000.
- [124] COUARAZE, G. et GROSSIORD, J.L, Initiation à la rhéologie, Lavoisier Tec & doc., Paris,1983.
- [125] DORLOT, J.M, BAILON, J.P. et Masounave, J. Des matériaux, Ed. E.P.M.Montréal, 1986.
- [126] DUNEAU, M. et JANOT, C, La magie des matériaux, Ed. O.Jacob, Paris, 1996.
- [127] François, D, PINEAU, A. et ZAOUÏ, A, Comportement mécanique des matériaux, Hermès, Paris, 1991.
- [128] GHANDI, M.V. and THOMPSON, B.S, Smart Materials and structures, Chapman & Hall, London,1992.
- [129] HULL, D, An Introduction to Composite Materials, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1981.
- [130] LEMETRE, J. Et CHABOCHE, J. L, Mécanique des matériaux solides, DUNOD, Paris, 1985.

- [131] LEMETRE, J, A. Course on Damage Mechanics, Springer, Berlin, 1996.
- [132] MERCIER, J. P, ZAMBELLI, G. et KURZ, W, Introduction à la science des matériaux, PPUR, Lausanne, 1990.
- [133] Electronic Materials, Ed. BRAITHWAITE, N. And WEAVER, G, Butterworths, Londres 1990.
- [134] Materials. Principles and Practice, Ed. BRAITHWAITE, N. And WEAVER, G, Butterworths, Londres 1990.
- [135] Proc. Of the Third International Conference on Intelligent Materials- Lyon 1996, Ed.
- [136] GOBIN, P.F. and TATIBOUET, J. Spie, Washington, 1996..
- [137] Structural Materials, Ed. WEIDMANN, G, LEWIS, P. D REID, N, Butterworths, Londres, 1990.

الخواص الكهربائية وظاهرة الناقلية في المحيط الغير متجانس

مفصلة حساب الصفاة نمازل المستمر ϵ_c من (متغاير) مبدل شطاف من حدة مراحل وبعد حل الفهم نمازل المستمر ϵ_c نوقشت في عملنا بطريقة رياضية في حين أن إدخال هذه الخاصية المصممة منحصري أن تعريب من ارتضان ϵ_c نمازل غيرا من النوايت ϵ_c ماء. نظرية النفاذ خلال المسامات . نظرية الطواهر العشوائية التي تقوم أساسا على مفاهيم رياضية كما الاحصاء حساباته وتقييم المنحسي التشطافات . وهذه النظرية على تساريع لترجمة السلوك من خواص من النظام يعتبر في ذلك الوقت انه من المرور من مرحلة إلى أخرى وعلى الأخص سلوكهم وحلت إلى مرحلة معينة من حذا إلى حدة التحول من النفاذ خلال المسامات. التقريب من صفاة بيئة (aem) إلى وحلة واحدة فقط مي (حريقة) حفة تطليه الطريقة التي تسمح لنا بأن تنجح إلى المنضبطة قيمة الفعال مواصلة الصمرباية وفقا لصور في حبه و المواصلة من حل مرحلة الدراسة من التوسيل في المحيط بعد فاء غير سائق مرحلة به تقريب صفاة بيئة (امي) يتبع لنا أن نتنبأ وصفا جيدا لنقل الظاهرة التي تحدث داخل نظم تقديمه متباين النفاذ خلال المسامات . وصفا في حين ملازمة على البيئة في مسألة أ شخبة متعجب. إن النصح الذي يبدو حاليا أكثر المستخدمة في المسح من التوسيل إليه هو أن يقاوم به في حل موقع من الذي نجحنا إلى القانون من حبيبي المعادن.

علامه متباية:

لازم خط الوسط متغاير الصمرباية النفاذية الفعال . والنقل الطواهر . بحسب الخاصية منحصري النفاذ خلال المسامات . المقاربه التطيه للبيئة :

Propriétés électriques et phénomènes de transport dans les milieux hétérogènes

Le problème du calcul de la constante diélectrique effective ϵ_c d'un milieu inhomogène formé de plusieurs phases ayant chacune une constante diélectrique ϵ_i est discuté dans notre travail d'une manière mathématique ceci en introduisant une fonction caractéristique géométrique qui exprime la dépendance de ϵ_c des autres constantes diélectrique ϵ_i . La fonction caractéristique géométrique est un outil mathématique très efficace, l'étude analytique de cette fonction à été trouvée à partir de l'analyse de ses propriétés mathématiques ; dans le cas d'un milieu à deux phases. Les variations linéaires de cette fonction nous ont permis de préciser le domaines de variation de la constate diélectrique effective. Nous avons présenté nos arguments en termes de constate diélectrique, mais tous les résultats trouvés sont aussi applicables au cas de la perméabilité magnétique, conductivité électrique etc.....La théorie de percolation, théorie des phénomènes stochastiques, basée essentiellement sur les concepts mathématiques tels que les calculs statistiques et l'évaluation des configurations géométriques, cette théorie permet de traduire le comportement des propriétés du système considéré lors de son passage d'une phase à l'autre, et plus particulièrement leurs comportement arrivés à un certain stade de transformation appeler seuil de percolation. L'approximation du milieu effectif (A M E) à une seule liaison est une méthode analytique efficace qui nous permet d'aboutir à une valeur exacte de la conductance électrique effective en fonction des fractions de volume et des conductances de chaque phase. L'étude de la conduction dans les mélanges ayant une phase non conductrice par approximation milieu effectif (A M E), nous permet de prévoir une bonne description des phénomènes de transport se déroulant à l'intérieur des systèmes présentant des seuils de percolation, et ceci en associant au milieu en question d'un réseau cubique. L'approche qui semble actuellement la plus utilisée dans l'étude de mécanisme de conduction par saut est la percolation à partir de laquelle nous aboutissons à la loi des métaux granulaires.

Mots clés :

Milieu inhomogène, permittivité électrique effective, phénomènes de transport, fonction caractéristique géométrique, percolation, approximation du milieu effectif;

Electrical properties and transport phenomena in heterogeneous media

The problem of the calculation of the efficient dielectric constant ϵ_c of an (inhomogeneous) middle formed of several phases having each a dielectric constant ϵ_i debated in our work in a mathematical manner this while introducing a geometric characteristic function that expresses the dependence of ϵ_c of other dielectric constants ϵ_i .

The theory of percolation, theory of stochastic phenomena based essentially on the mathematical concepts as the statistical calculations and the assessment of the geometric configurations, this theory permits to translate the behaviour of the properties of the considered system at the time of it passage from a phase to the other and more particularly their behaviour arrived to a certain stage of transformation called doorstep of percolation.

The approximation of the efficient milieu (AEM) to only one link is (a method) an efficient analytic method that allows us to succeed to an exact value of the effective electric conductance according to the fractions of the volume and the conductance of every phase.

The study of the conduction in the mixtures having q non driver phase by approximation efficient milieu (AME) allows us to foresee a good description of the transportation phenomenon taking place inside systems presenting thresholds of percolation and this while binding to the milieu in question of a cubic network.

Keywords :

Midfielder inhomogeneous electric permittivity effective, transport phenomena, according characteristic geometric percolation, approximating the actual environment;