CONDUCTIVITAT ELÈCTRICA

La conductivitat elèctrica d'una substància es defineix com la relació entre la intensitat de corrent elèctric produït i el camp elèctric que la produeix:

$$\sigma = \frac{I}{E}$$

el camp elèctric E es pot considerar l'*estímul*, que dóna lloc a una *resposta* en forma de corrent elèctric d'intensitat I, la relació entre els quals és σ . En un cristall, la direcció en que es produeix la resposta I, no ha de coincidir necessàriament amb la direcció en la qual s'aplica l'estímul E. Ambues estan relacionades pel tensor de nou components que representa la conductivitat elèctrica.

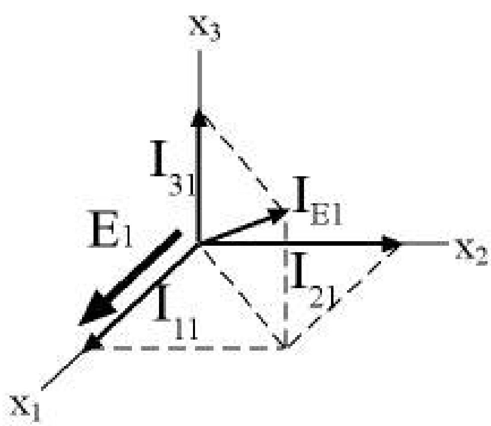


Figure 1: La intesitat de corrent produïda per la component sobre el primer eix (E1) del camp elèctric és I_{E1}, que es descomposa en les components I_{11}, I_{21} i I_{31}.

Les components del vector E sobre tres eixos ortogonals x_1, x_2, x_3, són E_1, E_2, E_3. Cada una d'aquestes components donarà lloc a una intensitat I_{Ei}, que a la vegada es pot descomposar en les tres components sobre cada un els eixos (Figura 1), les notacions de les qual són I_{ij}. En general, com regla nemotècnica I_{rs}, on r significa "resposta" i s "estimul". Els dos subindex estan en ordre alfabètic, i indiquen que es tracta de la respota sobre l'eix r produïda per la component de l'estímul sobre l'eix s.

De manera que la component I_{32} significa la component sobre l'eix 3 de la intensitat prodovaca per la component sobre l'eix 2 del camp elèctric aplicat.

Les respectives magnitud de les components de I_{E1} són proporcionals a l'estímul E_1 que les ha causat; i a la conductivitat elèctrica del cristall en la direcció de la resposta. Per tant, es poden definir les conductivitats elèctriques pels corrents produïts en les direccions dels eixos x_1, x_2 i x_3

$$I_{11} = \sigma_{11}E_1 \qquad\qquad I_{12} = \sigma_{12}E_2$$
$$I_{21} = \sigma_{21}E_1 \text{ , i de la maite manera } \quad I_{22} = \sigma_{22}E_2 \text{ , } \quad \text{i}$$
$$I_{31} = \sigma_{31}E_1 \qquad\qquad I_{32} = \sigma_{32}E_2$$

$$I_{13} = \sigma_{13}E_3$$
$$I_{23} = \sigma_{23}E_3$$
$$I_{33} = \sigma_{33}E_3$$

El camp elèctric s'ha descomposat en els tres components E_1, E_2 i E_3, i el corrent elèctric a que dóna lloc E serà la suma dels corrents originats per les tres components de E, és a dir I_{E1}, I_{E2} i I_{E3}.

Per tant, cada component I_i del corrent final resultant I, la podem considerar com la suma de cada un dels components sobre l'eix i dels corrents causats per E_1, E_2 i E_3. Ës a dir, a partir de les expresions anteriors

$$I_1 = I_{11} + I_{12} + I_{13} = \sigma_{11}E_1 + \sigma_{12}E_2 + \sigma_{13}E_3$$
$$I_2 = I_{21} + I_{22} + I_{23} = \sigma_{21}E_1 + \sigma_{22}E_2 + \sigma_{23}E_3$$
$$I_3 = I_{31} + I_{32} + I_{33} = \sigma_{31}E_1 + \sigma_{32}E_2 + \sigma_{33}E_3$$

Els nou components σ_{ij} constitueixen en tensor de la conductivitat elèctrica, i permet determinar la magnitud i direcció del corrent elèctric I originat per l'aplicació d'un camp elèctric E amb la següent expressió:

$$\begin{bmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{22} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{bmatrix}$$

Resposta vector I = tensor σ * estímul vector E

Efecte de la simetria sobre les propietats del tensor

El tensor deduït correspon a un cas general, però si els eixos de referència del tensor es porten a coincidir amb els elements de simetria del grup puntual del cristall alguns dels components del tensor s'igualen a zero, o entre ells, de manera que el tensor es simplifica. Per explicar que passa en aquests casos es considerarà separadament la coincidència de l'eix x_1 amb un eix i un pla de simetria.

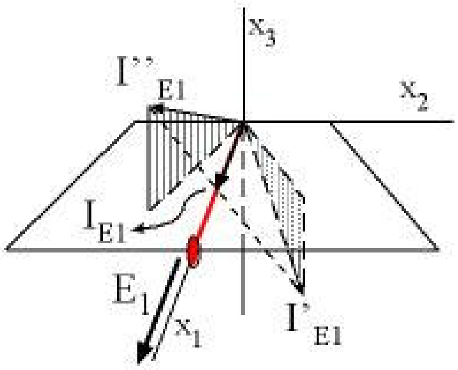


Figure 2

<u>Cas a: x_1 coincideix amb un eix binari</u>

Si x_1 coincideix amb un eix binari (Figura 2), i el corrent que provoca I'_{E1} no coincideix amb aquest eix, degut a la presència del binari, haurà d'existir necessàriament un altre corrent I''_{E1} relacionat amb el primer per la simetria del binari. La resultant d'aquests dos corrents elèctrics ha d'estar situada, per construcció, sobre l'eix x_1. Es pot comprendre fàcilment que aquest mateix fet tendria lloc si l'eix fos de qualsevol altre ordre (3, 4 o 6). Per tant, si una component de l'estímul E està sobre un eix de simetria, la resposta provocada per aquesta també ho estarà.

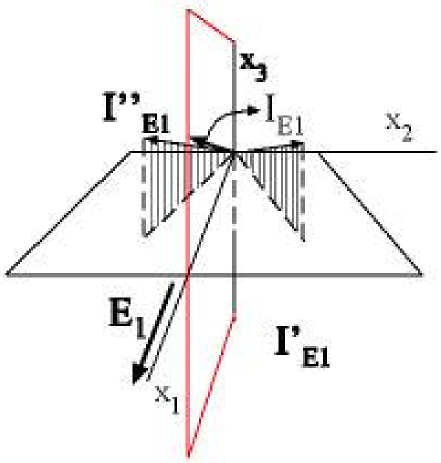


Figure 3

<u>Cas b: x_1 coincideix amb un pla de simetria</u>

Si x_1 coincideix amb un pla de simetria, i el corrent I'_{E1} provocat pel camp elèctric E_1 no coincideix amb l'eix ni amb el pla, la presència del pla donarà lloc a un altre corrent I''_{E1} simètric de l'anterior, de tal manera que la resultant de tots dos I_{E1} estarà sobre el pla de simetria, per be que no necessàriament coincident amb x_1, com es mostra a la Figura 3.

En sumari, es pot concloure que un estímul aplicat sobre un element de simetria dóna lloc a una resposta sobre el mateix element.

En tensor conductivitat en els diversos sistemes cristal·lins

La conductivitat elèctrica, com totes les propietats tensorials de segon ordre és centrosimètrica, és a dir que el corrent produït en la direcció $[uvw]$ és igual al ocasionat en $[\overline{u}\overline{v}\overline{w}]$. Per tant, a l'hora de considerar la simetria dels cristalls, cal tennir el compte el seu grup de Laue perquè es comporten som si tingessin centre de simetria.

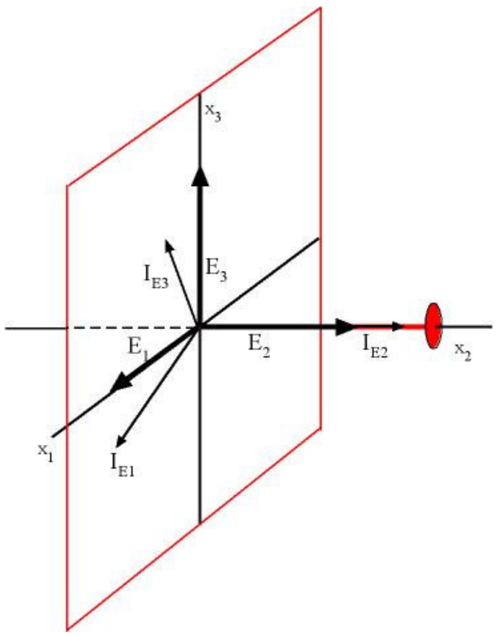


Figure 4

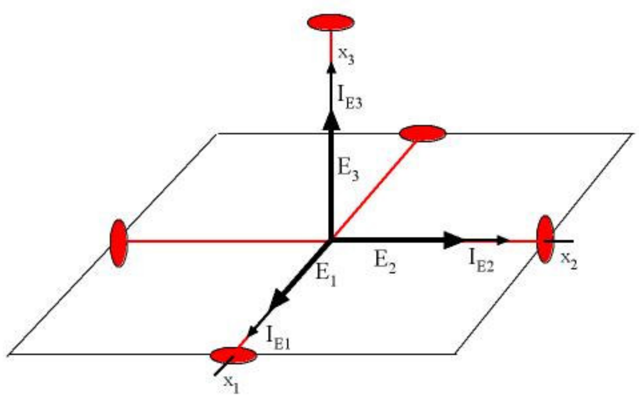
Sistema triclínic

El grup de Laue és $\overline{1}$, per tant cap eix por coincidir amb cap eix de simetria. Es tracta del cas general en que els coeficient del tensor són diferents (excepte els que comporta el fet que el tensor està diagonalitzat per l'efecte del centre de simetria).

Sistema monoclínic

El seu grup de Laue és ***2/m***, i per tant dos dels eixos (x_1 i x_3) estan sobre el pla, mentre que el tercer (x_2) està sobre l'eix binari (Figura 4). D'acord amb el que s'ha vist anteriorment, la resposta I_{E2} estarà sobre el binari, mentre que les I_{E1} i I_{E3} estaran sobre el pla de simetria. Les components sobre els eixos x_1 i x_3 del corrent I_{E2} seran zero, i per tant:

$I_{22} = \sigma_{22} E_2$ i com que $I_{12} = I_{32} = 0$,
els coeficients del tensor $\sigma_{12} = \sigma_{32} = 0$



Els camps aplicats sobre el pla donen respostes també sobre el pla, i per tant, les components de I_{E1} i I_{E3} sobre el segon eix, seran nules; és a dir

$I_{21} = I_{23} = 0$, i per tant els coeficients del tensor $\sigma_{21} = \sigma_{23} = 0$

I el tensor de la conductivitat elèctrica pels cristalls del sistema monoclínic queda

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \sigma_{13} \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ \sigma_{31} & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Sistema ròmbic

Com que el grup de Laue dels cristalls ròmbics és mmm, tots tres eixos coincideixen amb eixos de simetria binària. Per tant, les respectives respostes a E_1, E_2mi E_3 estan sobre els eixos bonaris, i sobre els tres eixos de referència.

Així dons, les components de I_{E1} sobre els eixos segon i tercer són nules; les de I_{E2} sobre els primer i tercer també són zero; i les de I_{E3} sobre els primer i segon eix també.

El tensor d'un cristall del sistema ròmbic és

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Sistemes trigonal, tetragonal i hexagonal

a) Pels cristalls amb simetries de Laue ***4/m***, **6/m** i $\overline{3}$ es pot situar l'eix x_3 coincident amb l'eix cristal·logràfic *z* (eix de simetria d'ordre 3, 4 o 6) i la resposta I_{E3} a la component E_3 del camp elèctric, concidirà amb x_3, i per tant

$$I_{13} = I_{23} = 0\text{, i}\quad \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0$$

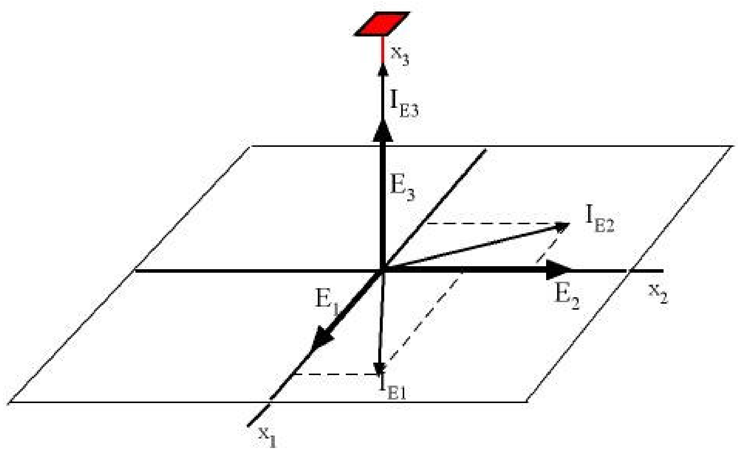


Figure 6

Les intensitats I_{E1} i I_{E2} dels corrents produïts per E_1 i E_2 tenen igual mòdul per la presència de l'eix 3, 4 o 6, però no coincideixen amb els eixos x_1 o x_2. Per tant, el tensor queda de la següent manera:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & 0 \\ -\sigma_{12} & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

b) Pels grups de Laue ***4/mmm***, ***6/mmm*** i ***32/m***, es pot fer coincidir x_3 amb l'eix de simetria superior a 2, mentre que els altres poden coincidir amb aixos binaris, per tant el tensor queda

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Sistema cúbic

Pels cristalls d'aquest sistema, la presència dels eixos ternaris en [111] i equivalents, i dels binaris o quaternaris en [100] etc. ocasiona que les tres components E_i coincideixin amb eixos de simetria, i a més a més que els mòduls de les intensitats produïdes per cada una d'aquestes components sigui igual. En aquestes condicions, el tensor és

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{11} \end{bmatrix}$$

Quàdrica representativa

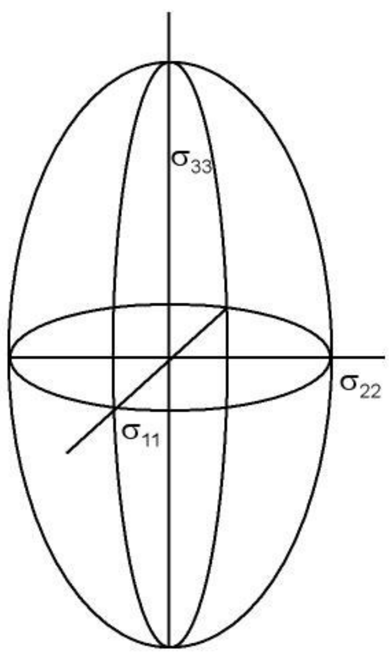


Figure 7: Elipsoide escalè de conductivitat elèctrica

Per simplicitat en l'explicació, i a fi d'obtenir equacions d'expressió relativament simple, suposarem el cas particular d'un tensor amb els tres eixos coincidents amb eixos de simetria, com en el cas del ròmbic, de manera que la seva expressió seria

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Suposem un camp elèctric unitari, les components del qual sobre els tres eixos són E_1, E_2 i E_3, de manera que s'acompleix

$$E_1^2 + E_2^2 + E_3^2 = 1$$

La intensitat de corrent produït en la direcció de cada un dels eixos val

$$I_1 = \sigma_{11}E_1$$
$$I_2 = \sigma_{22}E_2 \quad \text{i d'aquí que}$$
$$I_3 = \sigma_{33}E_3$$

$$E_1 = {I_1}/{\sigma_{11}}; \quad E_2 = {I_2}/{\sigma_{22}}; \quad E_3 = {I_3}/{\sigma_{33}}$$

substituïnt a l'equació anterior,

$$\frac{I_1^2}{\sigma_{11}} + \frac{I_2^2}{\sigma_{22}} + \frac{I_3^2}{\sigma_{33}} = 1$$

que correspon a una *quàdrica* que, com que tots els coeficient són possitius, es tracta d'un *elipsoide escalé*, amb els semieixos de valors σ_{11}, σ_{22} σ_{33} coincidents sobre x_1, x_2 i x_3, i el radi vector representa la intensitat produïda pel un camp elèctric unitari, dles components de la qual són I_1, I_2 i I_3.Aquest elipsoide és una superfície que representa la variació de la intensitat I en el cristall, i el radi vector és proporcional a I i a σ, perquè havent aplicat un camp E unitari

$$I = \sigma \cdot E$$

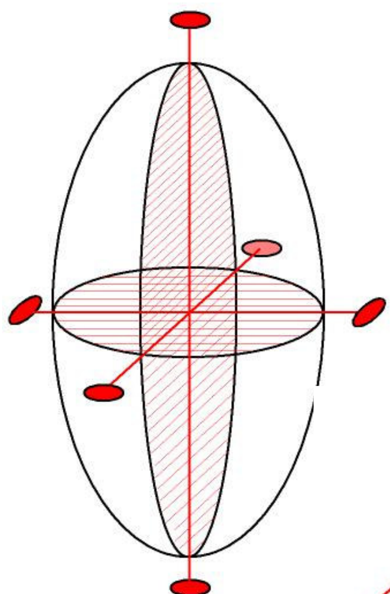


Figure 8: Simetria de l'elip escalé

Si no s'hagués partit d'un cas particular, l'equació de l'elipsoide fóra notablement més complexe, perquè aquest no tindria els semieixos sobre els eixos de referència.

Simetria i orientació de la quàdrica

En els sistemes triclínic, monoclínic i ròmbic, com que els tres valors de σ_{11}, σ_{22} σ_{33} són diferents, l'elipsoide que representa la conductivitat és escalé. La simetria d'un elipsoide escalé és ***mmm***, com s'ha representat a la Figura 8, i per tant, aquesta és la simetria de la conductivitat elèctrica.

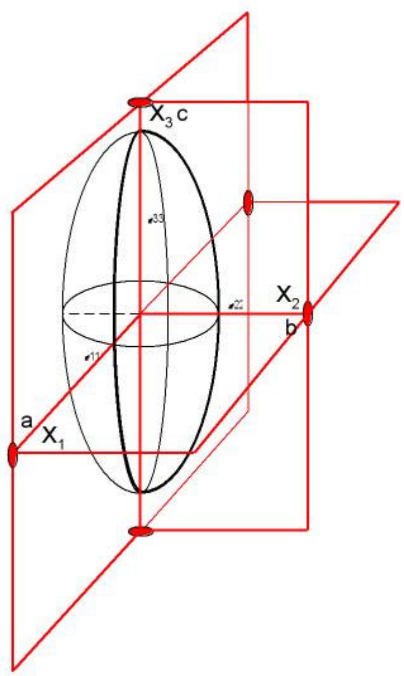


Figure 9 Orientació de l'elipsoide en relació al grup de Laue ***mmm***, del sistema ròmbic.

Aplicant el principi de Neumann, la simetria d'aquesta propietat ha d'incloure la simetria del grup de Laue del cristall, la qual cosa implica, no únicament que aquesta sigui un subgrup de la si metria de la conductivitat elè ctrica, sino que té implicacions pel que fa a l'orientació de l'elipsoide res pecte dels eixos cristal·logràfics.

Se guidament s'analitzarà cada un del s sistemes cristal·lins i es discutirà l'o rientació de la quàdrica.

Pe l cas del sistema triclínic (grup de La ue $\overline{1}$), la seva simetria qeda inc losa en la de la quàdrica, i per tant sigui quina sigui l'orientació de l'elipsoide, aquesta incluo la simetria dels cristalls triclínic

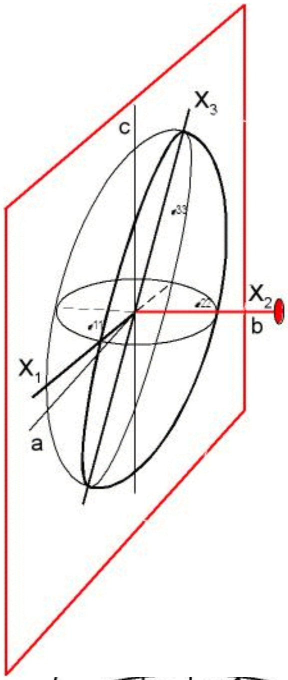


Figure 10 Situació de l'elipsoide en relació als elements de simetria del grup ***2/m***

Pels cristalls monoclínics, el seu grup de Laue queda inclós en la simetria ***mmm*** de l'elipsoide, però l'orientació d'aquest ha de ser amb un dels semieixos coincidint amb l'eix binari (eix cristal·logràfic *b*), mentre que els altres dos estan en qualsevol posició sobre el pla de simetria m, sense que necessàriament estiguin sobre els eixos cristal·logràfics.

Igualment, en el sistema ròmbic la simetria ***mmm*** coincideix amb la del grup de Laue, i a més a més, cal que els semieixos de l'elipsoide estiguin en la direcció dels eixos cristal·logràfics *x*, *y* i *z*.

El els casos dels sistemes trigonal, tetragonal i hexagonal, la simetria superior a dos dels respectius eixos ternari, quaternari i senari, imposa que dos dels semieixos de l'elipsoide siguin iguals per tal que aquest adopti la simetria ∞ / mmm. Es converteix, per tant, en un elipsoide de revolució.

El tensor, dons, queda de la següent manera

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

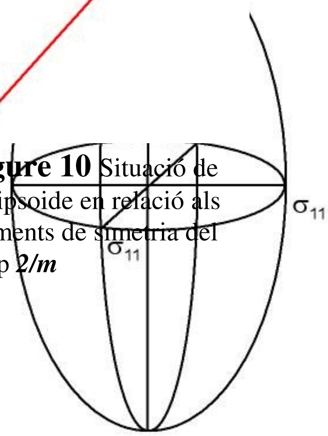


Figure 11 Elipsoide de revolució

La seva orientació respecte dels eixos cristal·logràfics ha de ser necessàriament amb el semiex de revolució en la direcció de l'eix *c*, i els altres dos en les de *a* i *b* en el cas del tetragonal, i en la direcció de *a* i a 90º en els altres dos.

I en els cristalls cúbics, la presència dels quatre eixos ternaris fa que els tres semiexos de l'elipsoide hagin de ser iguals per tal que la seva simetria inclogui a la dels grups de Laue del cúbic, per tant es transforma en una esfera, de simetria $\infty\infty\infty$. I el tensor és diagonal i els tres coeficients tenen el mateix valor.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{11} \end{bmatrix}$$

Magnitud de la conductivitat elèctrica en un direcció

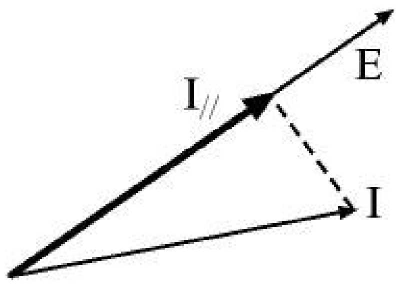


Figure 12

Quin és el significat de “la conductivitat elèctrica en la direcció [310] d’un cristall”?. Si en una direcció s’aplica un camp elèctric E, dóna lloc a un corrent d’intensitat I en una direcció no coincident amb E, la component del qual sobre E és $I_{//}$. La conductivitat en la direcció de E val

$$\sigma = \frac{I_{//}}{E},$$

si el camp elèctric val la unitat $\sigma = I_{//}$

Es possible arrivar a una expressió analítica: per simplificació en la deducció considerem els eixos del tensor com principals (coincidents amb els eixos de simetria). Per trovar l’expressió de la conductivitat en una direcció r, de cosinus directors r_1, r_2 i r_3, considerem el camp elèctric E aplicat en aquesta direcció, les components del qual són

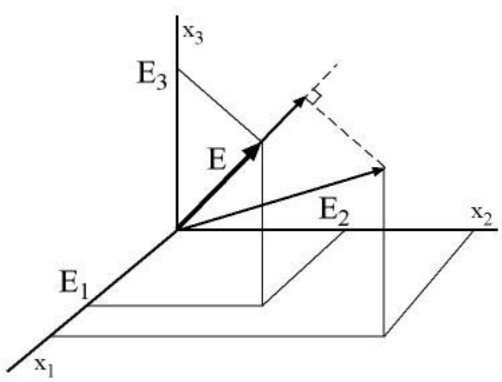


Figure 13

$$\vec{E} = \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3,$$

és a dir que $\vec{E} = r_1\vec{E} + r_2\vec{E} + r_3\vec{E}$

i el corrent produït és $\vec{I} = \sigma_1 r_1\vec{E} + \sigma_2 r_2\vec{E} + \sigma_3 r_3\vec{E}$

La component $I_{//}$ paral·lela a E es pot obtenir amb el producte escalar de I per un vector unitari en la direcció de r ($|\vec{r}| = 1$)

$$I_{//} = \vec{I} \cdot \vec{r}$$

i considerant l’anterior espressió de I,

$$I_{//} = r_1^2\sigma_1\vec{E} + r_2^2\sigma_2\vec{E} + r_3^2\sigma_3\vec{E}$$

Conseqüentment, la conductivitat en aquesta direcció val

$$\sigma = r_1^2\sigma_1 + r_2^2\sigma_2 + r_3^2\sigma_3$$

En els sistemes de simetria elevada (trigonal, tetragonal i hexagonal), com que $\sigma_1=\sigma_2$, l'anterior expressió queda

$$\sigma = \sigma_1(r_1^2 + r_2^2) + \sigma_3 r_3^2 \ ,$$

i com que $r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 = 1$, i per tant $(r_1^2 + r_2^2) = (1 - r_3^2)$

és a dir $\sigma = \sigma_1(1 - r_3^2) + \sigma_3 r_3^2$,

que és el mateix que $\sigma = \sigma_1 \sin^2\theta + \sigma_3 \cos^2\theta$, on ϑ és l'angle que forma *r* amb l'eix cristal·logràfic *c*.