CONDUCTIVIDAD ELÉCTRICA

La conductividad eléctrica de una substancia se define como la relación entre la intensidad de corriente eléctrica producida y el campo eléctrico que la produce:

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

el campo eléctrico E se puede considerar el *estímulo*, que da lugar a una *respuesta* en forma de corriente eléctrica de intensidad I, la relación entre los cuales es σ . En un cristal, la dirección en que se produce la respuesta I, no ha de coincidir necesariamente con la dirección en la cual se aplica el estímulo E. Ambas están relacionadas por el tensor de nueve componentes que representa la conductividad eléctrica.

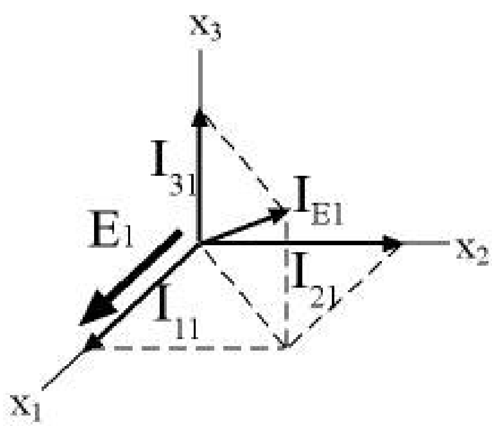


Figure 1: La intesidad de corriente producida por la componente sobre el primer eje (E1) del campo eléctrico es I_{E1}, que se descompone en las componentes I_{11}, I_{21} i I_{31}.

Las componentes del vector E sobre tres ejes ortogonales x_1, x_2, x_3, son E_1, E_2, E_3. Cada una de estas componentes dará lugar a una intensidad I_{Ei}, que a la vez se puede descomponer en las tres componentes sobre cada uno de los ejes (Figura 1), las notaciones de las cuales son I_{ij}. En general, como regla nemotécnica I_{rs}, donde r significa "respuesta" y s "estimulo". Los dos subíndices están en orden alfabético, e indican que se trata de la respuesta sobre el eje r producida por la componente del estímulo sobre el eje s.

De manera que la componente I_{32} significa la componente sobre el eje 3 de la intensidad provocada por la componente sobre el eje 2 del campo eléctrico aplicado.

Las respectivas magnitudes de las componentes de I_{E1} son proporcionales al estímulo E_1 que las ha causado; y a la conductividad eléctrica del cristal en la dirección de la respuesta. Por tanto, se pueden definir las conductividades eléctricas para las corrientes producidas en las direcciones de los ejes x_1, x_2 *i* x_3

$$I_{11} = \sigma_{11}E_1 \qquad\qquad I_{12} = \sigma_{12}E_2$$

$$I_{21} = \sigma_{21}E_1 \text{ , y de la misma manera } \quad I_{22} = \sigma_{22}E_2 \text{ ,} \quad \text{y}$$

$$I_{31} = \sigma_{31}E_1 \qquad\qquad I_{32} = \sigma_{32}E_2$$

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

El campo eléctrico se ha descompuesto en las tres componentes E_1, E_2 y E_3, y la corriente eléctrica a la que da lugar E será la suma de las corrientes originadas por las tres componentes de E, es decir I_{E1}, I_{E2} y I_{E3}.

Por tanto, cada componente I_i de la corriente final resultante I, la podemos considerar como la suma de cada una de las componentes sobre el eje y de las corrientes causadas por E_1, E_2 y E_3. Es decir, a partir de las expresiones anteriores

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

Los nueve componentes σ_{ij} constituyen un tensor de la conductividad eléctrica, y permite determinar la magnitud y dirección de la corriente eléctrica *I* originada por la aplicación de un campo eléctrico *E* con la siguiente expresión:

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

Respuesta vector I = tensor σ * estímulo vector E

Efecto de la simetria sobre las propiedades del tensor

El tensor deducido corresponde a un caso general, pero si los ejes de referencia del tensor se llevan a coincidir con los elementos de simetria del grupo puntual del cristal algunos de los componentes del tensor se igualan a cero, o entre ellos, de manera que el tensor se simplifica. Para explicar que pasa en estos casos se considerará separadamente la coincidencia del eje x_1 con un eje y un plano de simetria.

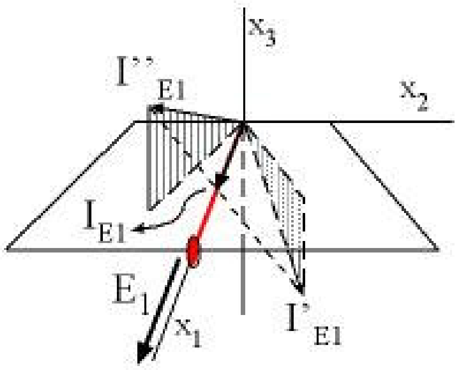


Figure 2

<u>Caso a: x_1 coincide con un eje binario</u>

Si x_1 coincide con un eje binario (Figura 2), y la corriente que provoca I'_{E1} no coincide con este eje, debido a la presencia del binario, tendrá que existir necesariamente otra corriente I''_{E1} relacionada con el primero por la simetria del binario. La resultante de estas dos corrientes eléctricas ha de estar situada, por construcción, sobre el eje x_1. Se puede comprender facilmente que este mismo hecho tendría lugar si el eje fuera de cualquier otro orden (3, 4 o 6). Por tanto, si una componente del estímulo E está sobre un eje de simetria, la respuesta provocada por esta también lo estará.

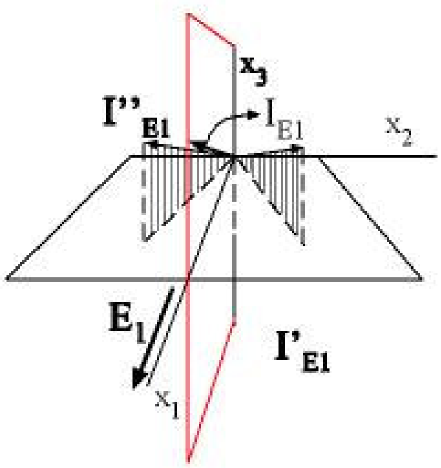


Figure 3

<u>Caso b: x_1 coincide con un plano de simetria</u>

Si x_1 coincide con un plano de simetria, y la corriente I'_{E1} provocada por el campo eléctrico E_1 no coincide con el eje ni con el plano, la presencia del plano dará lugar a otra corriente I''_{E1} simétrica del anterior, de tal manera que la resultante de las dos I_{E1} estará sobre el plano de simetria, por bien que no necesariamente coincidente con x_1, como se muestra en la Figura 3.

En resumen, se puede concluir que un estímulo aplicado sobre un elemento de simetria da lugar a una respuesta sobre el mismo elemento.

El tensor conductividad en los diversos sistemas cristalinos

La conductividad eléctrica, como todas las propiedades tensoriales de segundo orden es centrosimétrica, es decir que la corriente producida en la dirección $[uvw]$ es igual a la ocasionada en $[\bar{u}\bar{v}\bar{w}]$. Por tanto, a la hora de considerar la simetria de los cristales, hay que tener en cuenta su grupo de Laue porqué se comportan como si tuvieran centro de simetria.

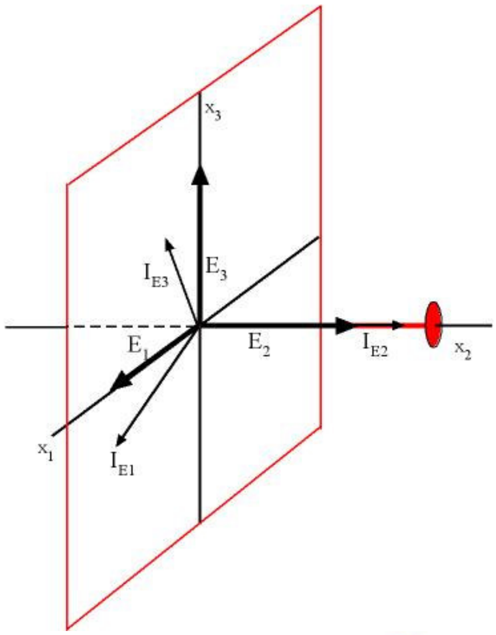
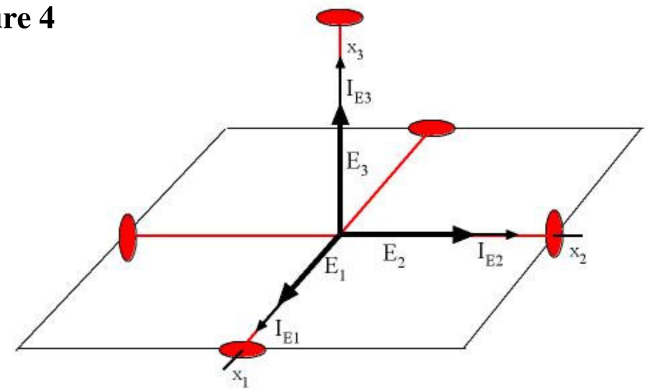


Figure 4



<u>Sistema triclínico</u>

El grupo de Laue es $\bar{1}$, por tanto ningún eje por coincidir con ningú eje de simetria. Se trata del caso general en que los coeficientes del tensor son diferentes (excepto los que comporta el hecho que el tensor está diagonalizado por el efecto del centro de simetria).

<u>Sistema monoclínico</u>

Su grupo de Laue es ***2/m***, y por tanto dos de los ejes (x_1 y x_3) están sobre el plano, mientras que el tercero (x_2) está sobre el eje binario (Figura 4). De acuerdo con lo que se ha visto anteriormente, la respuesta I_{E2} estará sobre el binario, mientras que las I_{E1} y I_{E3} estarán sobre el plano de simetria. Las componentes sobre los ejes x_1 y x_3 de la corriente I_{E2} serán cero, y por tanto:

$I_{22} = \sigma_{22} E_2$ Y como que $I_{12} = I_{32} = 0$,

los coeficientes del tensor $\sigma_{12} = \sigma_{32} = 0$

Los campos aplicados sobre el plano dan respuestas también sobre el plano, y por tanto, las componentes de I_{E1} y I_{E3} sobre el segundo eje, serán nulas; es decir

$I_{21} = I_{23} = 0$, y por tanto los coeficientes del tensor $\sigma_{21} = \sigma_{23} = 0$

Y el tensor de la conductividad eléctrica para los cristales del sistema monoclínico queda

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

<u>Sistema rómbico</u>

Como el grupo de Laue de los cristales rómbicos es mmm, los tres ejes coinciden con ejes de simetria binaria. Por tanto, las respectivas respuestas a E_1, E_2 y E_3 están sobre los ejes binarios, y sobre los tres ejes de referencia.

Así pues, las componentes de I_{E1} sobre los ejes segundo y tercero son nulas; las de I_{E2} sobre el primero y tercero también son cero; y las de I_{E3} sobre el primero y segundo eje también.

El tensor de un cristal del sistema rómbico es

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

<u>Sistemas trigonal, tetragonal y hexagonal</u>

a) Para los cristales con simetrias de Laue ***4/m***, **6/m** y $\overline{3}$ se puede situar el eje x_3 coincidente con el eje cristalográfico *z* (eje de simetria de orden 3, 4 o 6) y la respuesta I_{E3} a la componente E_3 del campo eléctrico, concidirá con x_3, y por tanto

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

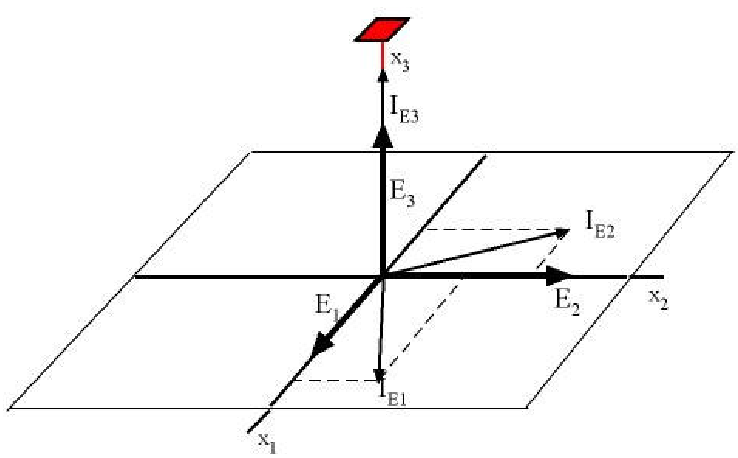


Figure 6

Las intensidades I_{E1} y I_{E2} de las corrientes producidas por E_1 y E_2 tienen igual módulo para la presencia del eje 3, 4 o 6, pero no coinciden con los ejes x_1 o x_2. Por tanto, el tensor queda de la siguiente manera:

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

b) Para los grupos de Laue ***4/mmm***, ***6/mmm*** y ***32/m***, se puede hacer coincidir x_3 con el eje de simetria superior a 2, mientras que los otros pueden coincidir con ejes binarios, por tanto el tensor queda

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

<u>Sistema cúbico</u>

Para los cristales de este sistema, la presencia de los ejes ternarios en [111] y equivalentes, y de los binarios o cuaternarios en [100] etc. ocasiona que las tres componentes E_i coinciden con ejes de simetria, y además que los modulos de las intensidades producidas por cada una de estas componentes sea igual. En estas condiciones, el tensor es

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

Cuádrica representativa

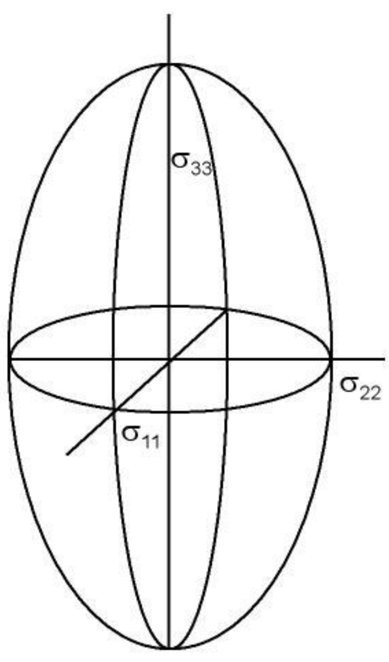


Figure 7: Elipsoide escaleno de conductividad eléctrica

Para simplicidad en la explicación, y a fin de obtener ecuaciones de expresión relativamente simple, supondremos el caso particular de un tensor con los tres ejes coincidentes con ejes de simetria, como en el caso del rómbico, de manera que la su expresión sería

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

Supongamos un campo eléctrico unitario, las componentes del cual sobre los tres ejes son E_1, E_2 y E_3, de manera que se cumple

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

La intensidad de corriente producida en la dirección de cada uno de los ejes vale

$$I_1 = \sigma_{11} E_1$$
$$I_2 = \sigma_{22} E_2 \quad \text{y de aquí que}$$
$$I_3 = \sigma_{33} E_3$$

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

sustituyendo en la ecuación anterior,

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

que corresponde a una *cuádrica* que, como todos los coeficientes son positivos, se trata de un *elipsoide escaleno*, con los semiejes de valores σ_{11}, σ_{22} σ_{33} coincidentes sobre x_1, x_2 i x_3, y el radio vector representa la intensidad producida por un camp eléctrico unitario, de las componentes de la cual son I_1, I_2 y I_3. Este elipsoide es una superfície que representa la variación de la intensidad I en el cristal, y el radio vector es proporcional a I y a σ, porqué habiendo aplicado un campo E unitario

$$I = \sigma \cdot E$$

Si no se hubiera partido de un caso particular, la ecuación del elipsoide seria notablemente más compleja, porqué esta no tendría los semiejes sobre los ejes de referencia.

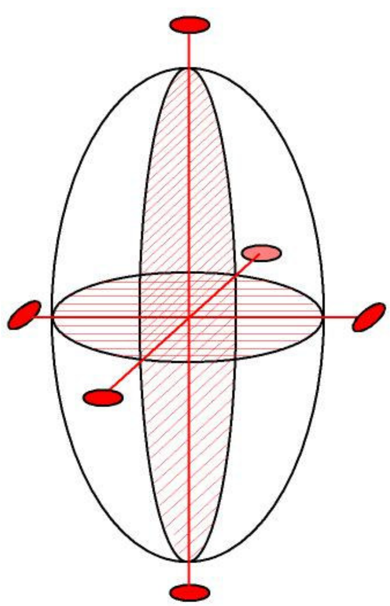


Figure 8: Simetria de l'elipsoide escalé

Simetria y orientación de la cuádrica

En los sistemas triclínico, monoclínico y rómbico, como los tres valores de σ_{11}, σ_{22} σ_{33} son diferentes, el elipsoide que representa la conductivitdad es escaleno. La simetria de un elipsoide escaleno es ***mmm***, como se ha representado en la Figura 8, i por tanto, esta es la simetria de la conductividad eléctrica.

Aplicando el principio de Neumann, la simetria de esta propiedad ha de incluir la simetria del grupo de Laue del cristal, la cual cosa implica, no únicamente que esta sea un subgrupo de la simetria de la conductividad eléctrica, sino que tiene implicaciones pen lo que respecta a la orientación del elipsoide respecto de los ejes cristalográficos.

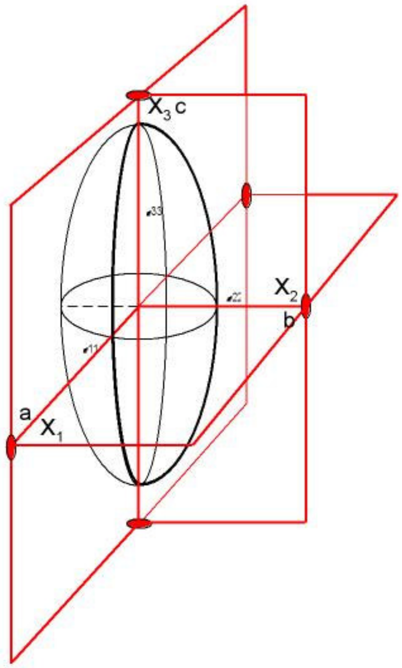


Figure 9 Orientación del elipsoide en relació al grupo de Laue ***mmm***, del sistema rómbico.

Seguidamente se analizará cada uno de los sistemas cristalinos y se discutirá la orientación de la cuádrica.

Para el caso del sistema triclínico (grupo de Laue $\overline{1}$), su simetria queda incluida en la de la cuádrica, y por tanto sea cual sea la orientación del elipsoide, esta incluye la simetria de los cristales triclínico

Para los cristales monoclínicos, su grupo de Laue queda incluido en la simetria ***mmm*** del elipsoide, pero la orientación de este ha de ser con un de los semiejes coincidinte con el eje binario (eje cristalográfico *b*), mientras que los otros dos estan en cualquier posición sobre el plano de simetria m, sin que necessriamente esten sobre los ejes cristalográficos.

Igualmente, en el sistema rómbico la simetria ***mmm*** coincide con la del grupo de Laue, y además, hace falta que los semiejes del elipsoide esten en la dirección de los ejes cristalográficos *x*, *y* y *z*.

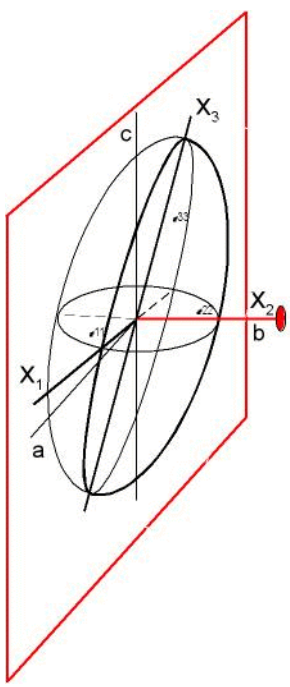


Figure 10 Situación del elipsoide en relación a los elementos de simetria del grupo ***2/m***

En el caso de los sistemas trigonal, tetragonal y hexagonal, la simetria superior a dos de los respectivos ejes ternario, cuaternario y senario, impone que dos de los semiejes del elipsoide sean iguales para que este adopte la simetria ∞ / mmm. Se convierte, por tanto, en un elipsoide de revolución.

El tensor, entonces, queda de la siguiente manera

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

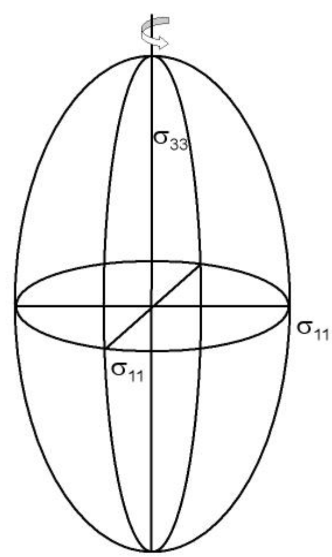


Figure 11 Elipsoide de revolución

Su orientación respecto de los ejes cristalográficos ha de ser necesariamente con el semieje de revolución en la dirección del eje *c*, y los otros dos en las de *a* y *b* en el caso del tetragonal, y en la dirección de *a* y a 90º en los otros dos.

Y en los cristales cúbicos, la presencia de los cuatro ejes ternarios hace que los tres semiejes del elipsoide tengan que ser iguales para que su simetria incluya la de los grupos de Laue del cúbico, por tanto se transforma en una esfera, de simetria $\infty\infty\infty$. Y el tensor es diagonal y los tres coeficientes tienen el mismo valor.

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

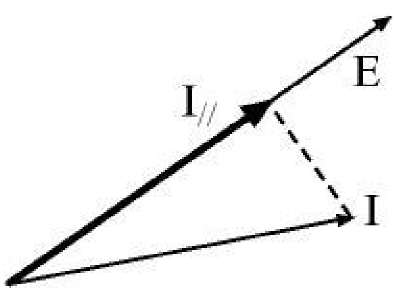


Figure 12

Magnitud de la conductividad eléctrica en un dirección

¿Cual es el significado de “la conductividad eléctrica en la dirección [310] de un cristal”?. Si en una dirección se aplica un campo eléctrico *E*, da lugar a una corriente de intensidad *I* en una dirección no coincidente con *E*, la componente del cual sobre *E* es $I_{//}$. La conductividad en la dirección de *E* vale

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

si el campo eléctrico vale la unidad $\sigma = I_{//}$

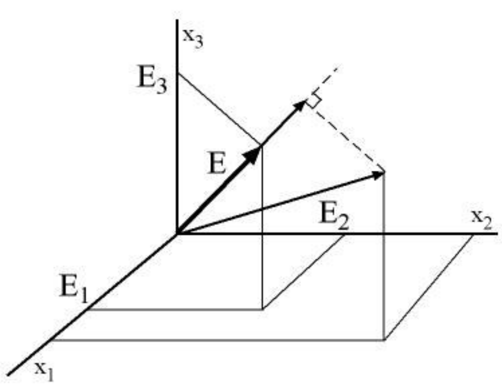


Figure 13

Es posible llegar a una expresión analítica: por simplificación en la deducción consideramos los ejes del tensor como principales (coincidentes con los ejes de simetria). Para encontrar la expresión de la conductividad en una dirección *r*, de cosinus directores r_1, r_2 y r_3, consideramos el campo eléctrico *E* aplicado en esta dirección, las componentes de la cual son

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

es decir que $\vec{E} = r_1\vec{E} + r_2\vec{E} + r_3\vec{E}$

y la corriente producida es $\vec{I} = \sigma_1 r_1\vec{E} + \sigma_2 r_2\vec{E} + \sigma_3 r_3\vec{E}$

La componente $I_{//}$ paralela a E se puede obtener con el producto escalar de I por un vector unitario en la dirección de r ($|\vec{r}| = 1$)

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

y considerando la anterior expresión de I,

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

Consecuentemente, la conductividad en esta dirección vale

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

En los sistemas de simetria elevada (trigonal, tetragonal y hexagonal), como $\sigma_1=\sigma_2$, la anterior expresión queda

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

y como $r_1^2 + r_2^2 + r_3^2 = 1$, y por tanto $(r_1^2 + r_2^2) = (1 - r_3^2)$

es decir $\sigma = \sigma_1(1 - r_3^2) + \sigma_3 r_3^2$,

que es el mismo que $\sigma = \sigma_1 \sin^2\theta + \sigma_3 \cos^2\theta$, donde ϑ es el àngulo que forma r con el eje cristalográfico c.