

# CIENCIA DE MATERIALES: PROPIEDADES DE LOS MATERIALES

PROPIEDADES ELÉCTRICAS

La ley de Ohm determina la resistencia de un material

$$V = I R$$

La resistencia R de un resistor es función del tamaño, forma y propiedades de los materiales

$$R = \rho \frac{l}{A} = \frac{l}{\sigma A}$$

La resistividad es sensible a la microestructura. Por ejemplo, la resistividad del cobre puro es mucho menor que el cobre comercial. Asimismo, cuando el cobre es recocido, esto elimina las dislocaciones existentes, lo que mejora la resistividad debido a un menor número de obstáculos para los electrones.

La potencia eléctrica perdida por la generación de calor en una resistencia es

$$P = V I = I^2 R$$

Se conocen como pérdidas de calentamiento de Joule.

La densidad de corriente se define a partir de las ecuaciones anteriores.

$$\frac{I}{A} = \sigma \frac{V}{l}$$

$I/A$  es la densidad de corriente  $J$  y la relación  $V/l$  es el campo eléctrico  $E$

$$J = \sigma E$$

$$J = nq\bar{v}$$

$n$  es el número de portadores de carga ( $\text{m}^{-3}$ ),  $q$  es la carga de los portadores ( $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ ) y  $\bar{v}$  es el promedio de la velocidad de difusión de los portadores.

$$\sigma E = nq\bar{v}$$

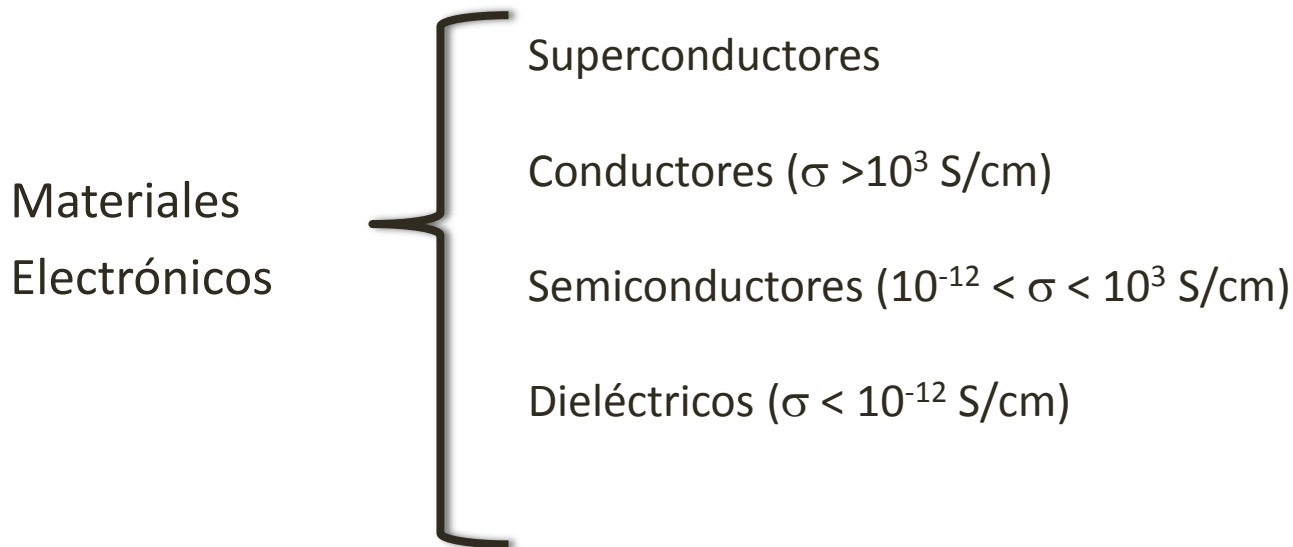
$$\sigma = nq \frac{\bar{v}}{E} = nq\mu$$

Se observa por tanto que la conductividad depende del número de portadores de carga y de la movilidad. En los metales el factor controlante es la movilidad, mientras que en conductores iónicos, semiconductores y aislantes es más importante el número de portadores.

Se puede decir que en los semiconductores hay dos tipos de portadores de carga simultáneamente

$$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p$$

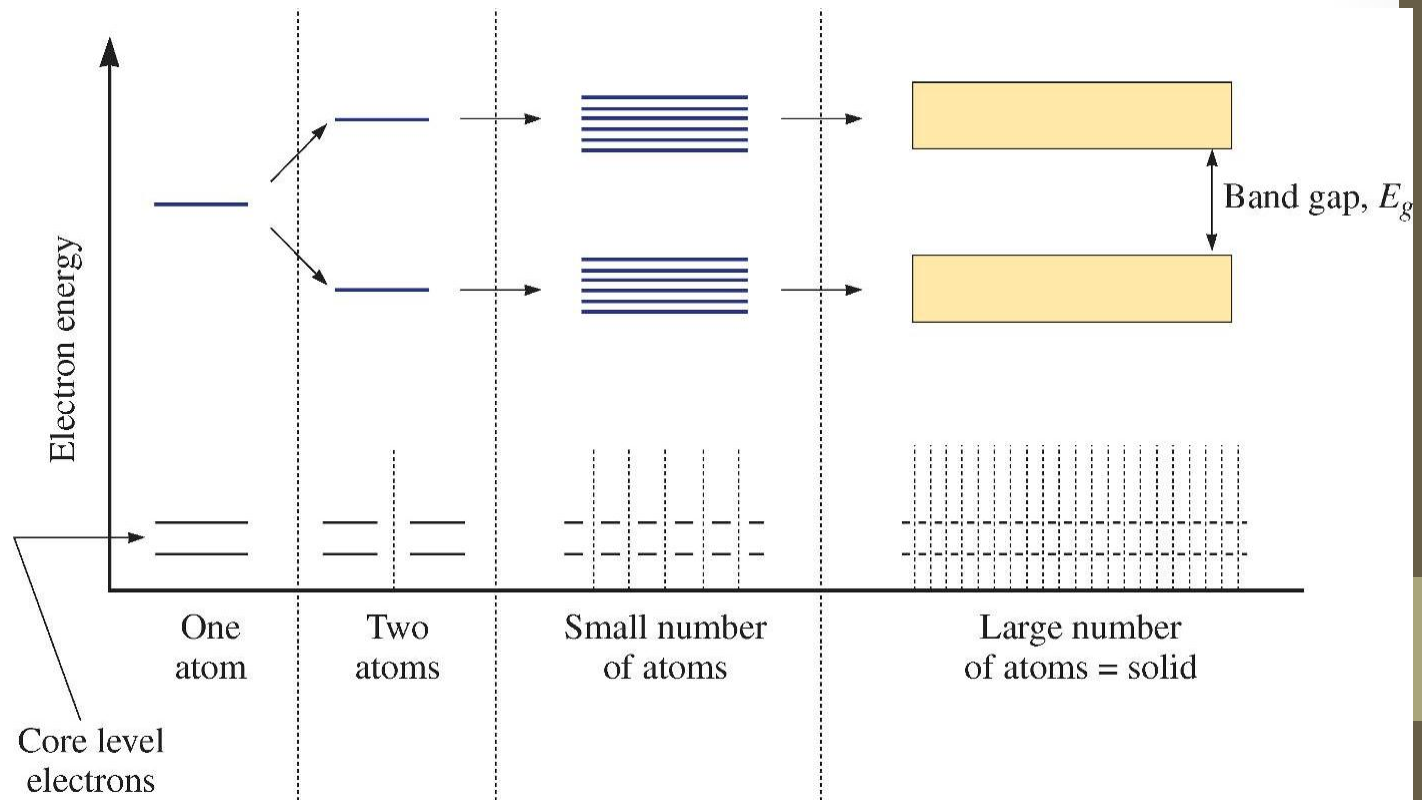
Mientras que en las cerámicas la conducción puede ser debida a electrones o la difusión de iones



En los dieléctricos es importante la perspectiva de la constante dieléctrica  $k$ , relacionada con la capacidad de un material para almacenar cargas.

# Estructura de bandas

El principio de exclusión de Pauli establece que sólo dos electrones pueden tener la misma energía en un orbital para un átomo. Cuando  $N$  átomos están unidos en un material, aún debe cumplirse el principio de exclusión de Pauli. Esta es la razón por la que los niveles de energía se dividen para formar nuevos niveles.



# Estructura de bandas de los metales

El sodio tiene estructura electrónica  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ . El último nivel está lleno sólo a la mitad, por lo que en el cero absoluto sólo estarán ocupados los niveles de energía más bajos. Esto es conocido como el nivel de Fermi ( $E_f$ ): nivel de energía en que la mitad de los posibles niveles de la banda está ocupada, por lo que la probabilidad de hallar un electrón es de  $1/2$ .

En otro tipo de metales, los orbitales  $s$  y  $p$  se hibridizan y permite que los electrones sean promovidos con mayor facilidad a esta banda combinada. Específicamente para metales de transición, el traslape se da entre los orbitales  $d$  con los  $s$ . Sin embargo, los orbitales  $d$  producen una interacción más compleja.

# Estructura de bandas de semiconductores y aislantes

Los elementos del grupo IV tienen los orbitales p sin llenar con 2 electrones, aunque el enlace covalente ocasiona que estos electrones se localicen fuertemente. Se produce la hibridización de los orbitales s y p para producir dos bandas con capacidad para  $4N$  electrones, pero justamente sólo hay  $4N$  electrones. Esto ocasiona que solamente se llene por completo una banda (banda de valencia) mientras la otra está vacía (banda de conducción).

Las diferentes energías de cada banda produce una separación entre ellas conocida como la brecha entre bandas o brecha de energía o banda prohibida  $E_g$  que en el diamante es de alrededor de 5.5 eV.

Al excitar estos materiales con algún tipo de energía, se proporciona a los electrones el suministro para saltar esta brecha de energía y producir la conducción eléctrica.

En el Ge, Si y Sn las brechas de energía son menores (0.67, 1.1 y 0.1 eV). Este criterio también ha servido para clasificar a los materiales: aquéllos con  $E_g > 4$  eV se consideran aislantes, los que tienen  $E_g < 4$  eV se consideran semiconductores.

# metales

El aumento de temperatura ocasiona que aumenten las vibraciones de la red, por lo que afecta a la trayectoria libre promedio de los electrones.

$$\rho = \rho_{RT}(1 + \alpha_R \Delta T)$$

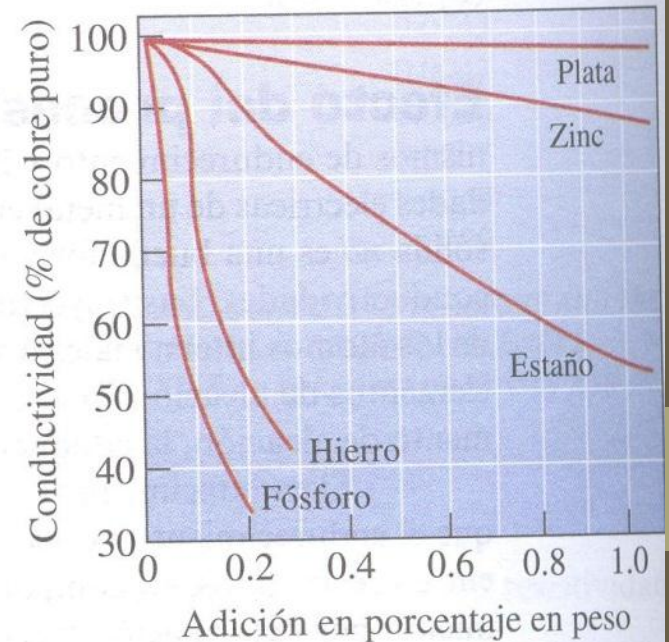
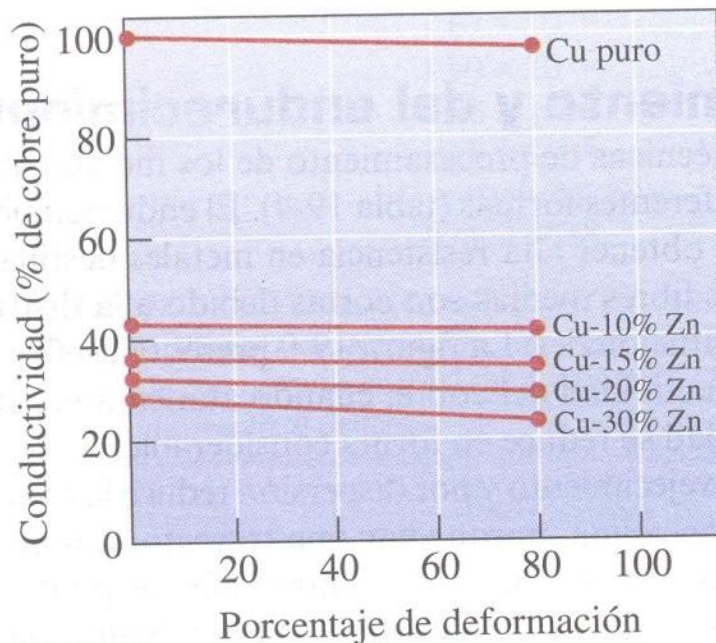
Las impurezas tienen un efecto similar al actuar como obstáculos para la difusión electrónica

$$\rho_d = b(1 - x)x$$

$$\rho = \rho_T + \rho_d$$

Los diferentes tratamientos afectan en diversas formas a la resistividad en los metales. Por ejemplo, el endurecimiento por formación de solución sólida le afecta negativamente. El envejecimiento y la dispersión le afectan menos debido a la existencia de una menor cantidad de impurezas y los precipitados formados son extensos en comparación con defectos puntuales.

El endurecimiento por deformación y control de tamaño de grano le afectan incluso menos a la resistividad, debido a que la trayectoria libre promedio aumenta gracias al trabajo en frío.



b)

# semiconductores

En el caso de semiconductores intrínsecos existe igual número de electrones y huecos.

$$\sigma = qn_i(\mu_n + \mu_p)$$

Al aumentar la temperatura hay una mayor probabilidad de que un nivel de energía superior sea ocupado. Esto se expresa por

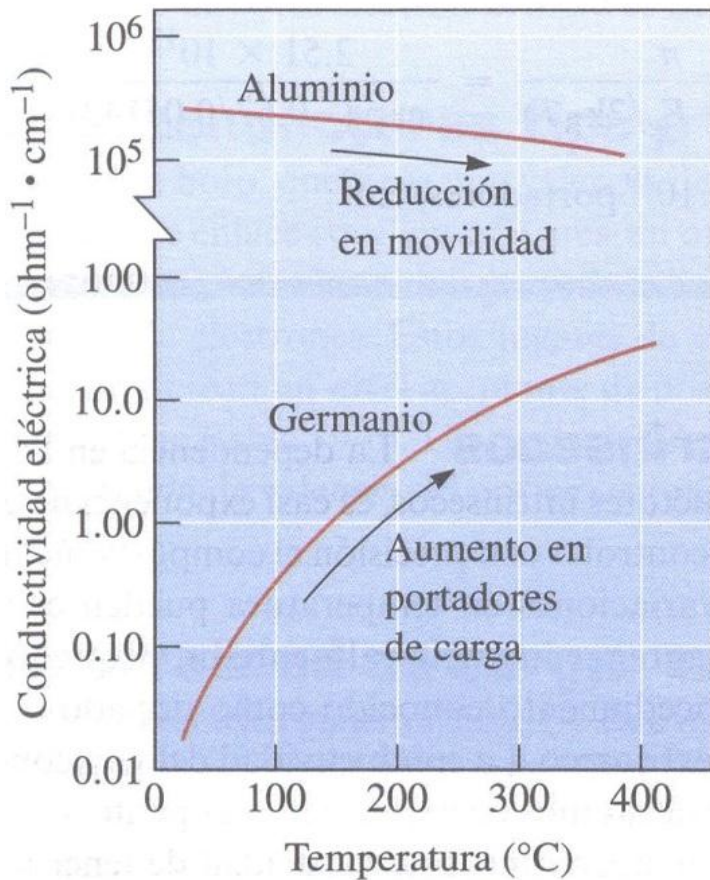
$$n = n_i = p_i = n_0 \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right)$$

$n_0$  está dado por

$$n_0 = 2 \left(\frac{2\pi k_B T}{h^2}\right)^{3/2} (m_n^* m_p^*)^{3/4}$$

$$\sigma = n_0 q (\mu_n + \mu_p) \exp\left(\frac{-E_g}{2k_B T}\right)$$

Las masas efectivas están relacionadas con las fuerzas internas que alteran la aceleración de los electrones en el sólido con respecto al vacío.



Para el Ge a 25°C estime a) el número de portadores de carga, b) la fracción total de electrones de la banda de valencia excitados para pasar a la banda de conducción y c) la constante  $n_0$ . Se sabe que el Ge tiene la estructura del diamante con parámetro  $a=5.6575 \times 10^{-8}$  cm

En el caso de semiconductores extrínsecos la conductividad depende fuertemente del número de impurezas y es casi independiente de la temperatura.

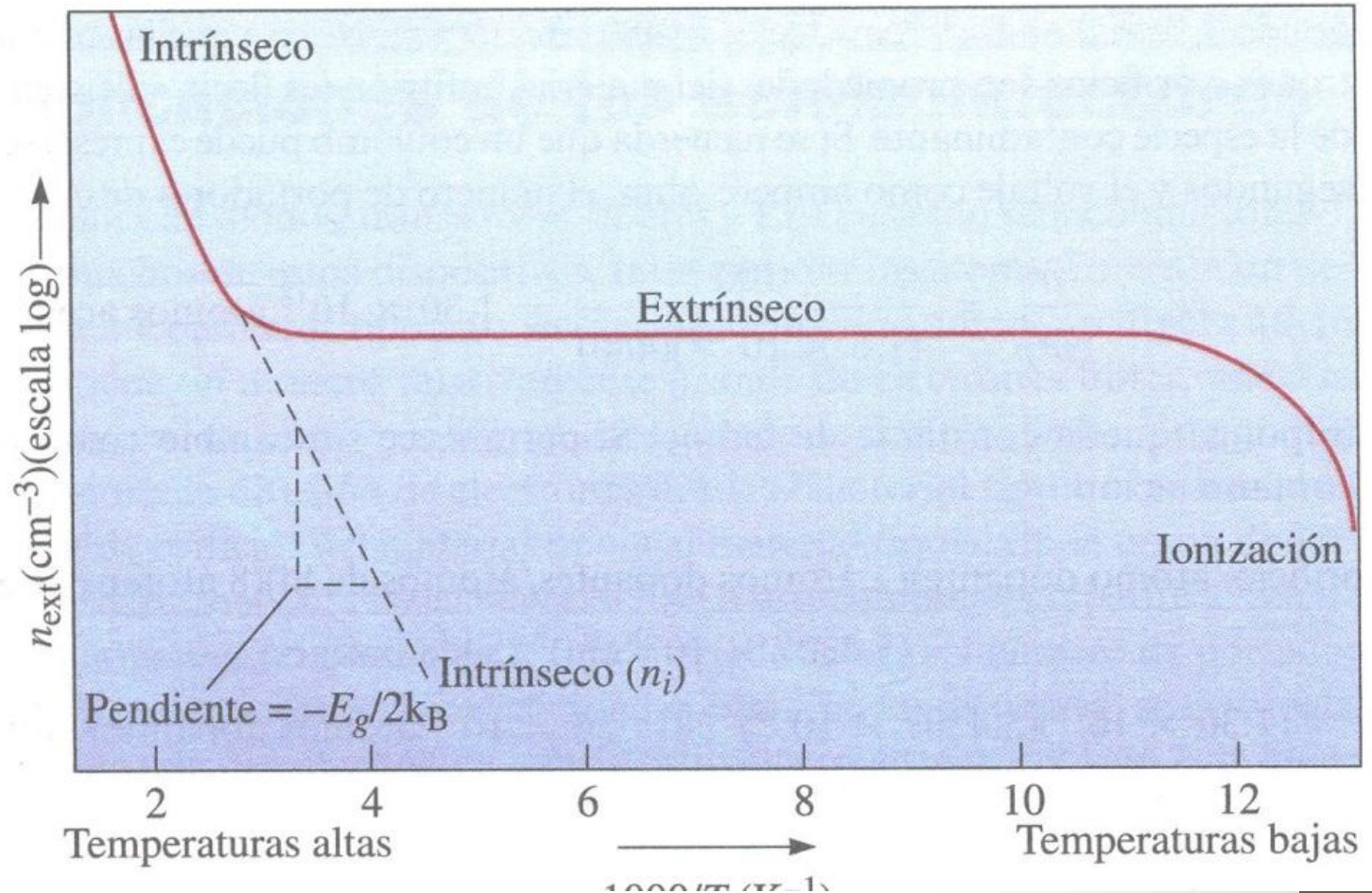
Un dopante tipo  $n$  dona un electrón libre por cada átomo de impureza, por lo que la brecha de energía ha disminuido a un valor  $E_d$ . Esto ocurre cuando la impureza tiene una valencia mayor al original, ocasionando que el electrón adicional quede en un estado de energía justo por debajo de la banda de conducción.

En los semiconductores tipo  $p$ , la impureza tiene una valencia menor a la del original; no se tienen suficientes electrones para establecer el enlace covalente, por lo que se crea un hueco electrónico en la banda de valencia que puede ser llenado por otros electrones. Estos huecos actúan como aceptores de electrones con energías más altas a la normal de la banda de valencia. Por esto es más fácil producir un hueco en la banda de valencia.

$$p_{ext} + N_d = n_{ext} + N_a$$

Si el semiconductor es de tipo  $n$ , se tiene donación de electrones de modo que  $N_d \gg n_i$  y esto ocasiona que la ecuación sea  $n_{ext} \approx N_d$ .

Por otro lado, si se tiene un semiconductor tipo  $p$ , se tendrá que  $N_a \gg p_i$  y la ecuación será  $p_{ext} \approx N_a$ .

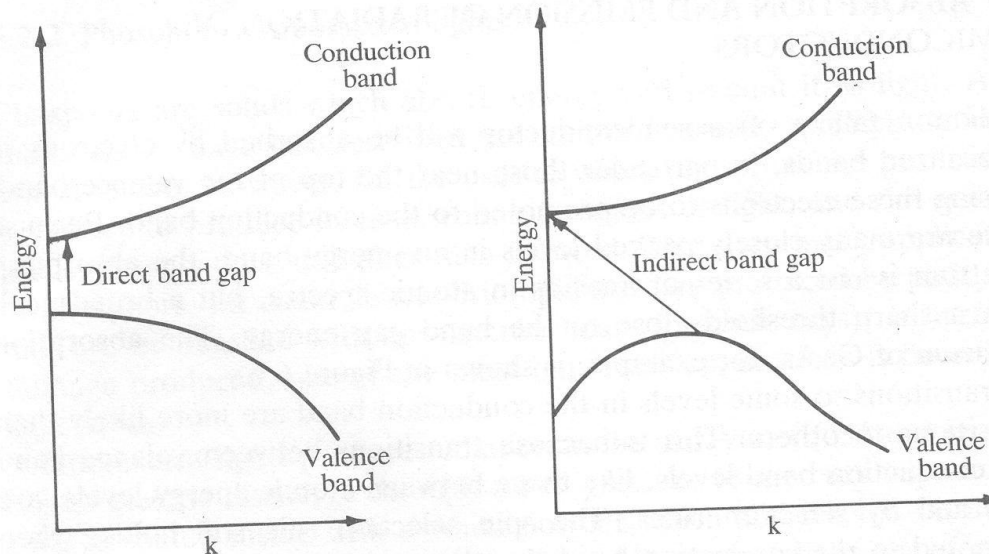


# Semiconductores de brecha de banda directa e indirecta

En un semiconductor de salto de banda directo, un electrón no cambia su momento al pasar de la banda de conducción a la banda de valencia, por ejemplo, el GaAs. Al regresar a la banda de valencia, el electrón devuelve su energía de excitación y produce luz (recombinación radiante).

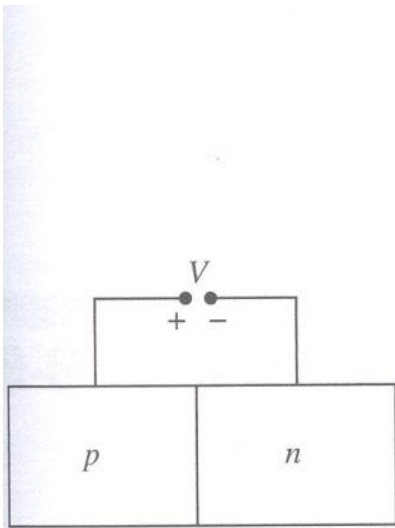
$$E_g = h\nu$$

En un semiconductor de salto de banda indirecto, el regreso a la banda de valencia no puede ser directo sin cambiar el momento del electrón. Esto ocasiona que el electrón al regresar a su estado basal no emita luz, sino que a cambio produce calor (recombinación no radiante).

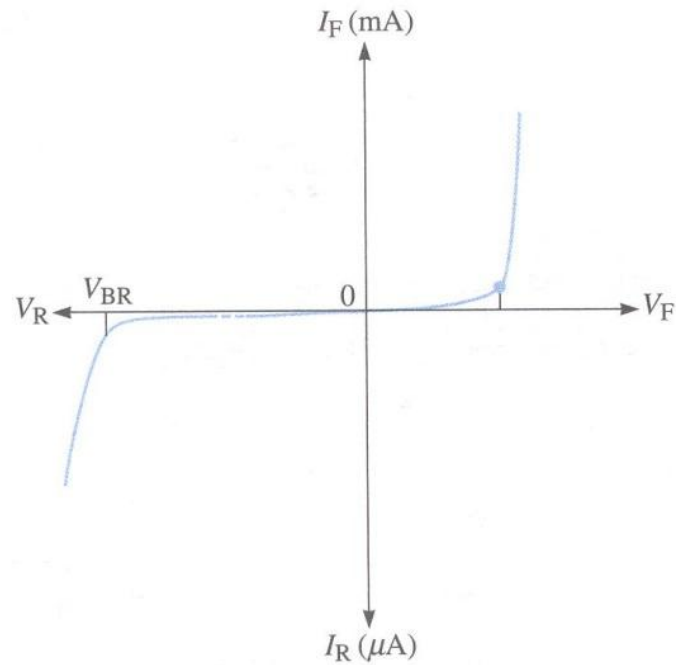


# Aplicaciones

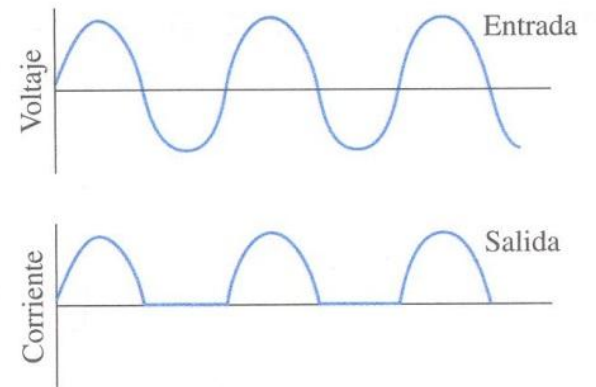
- Diodos rectificadores
- Transistores de unión bipolar
- Transistores de efecto de campo



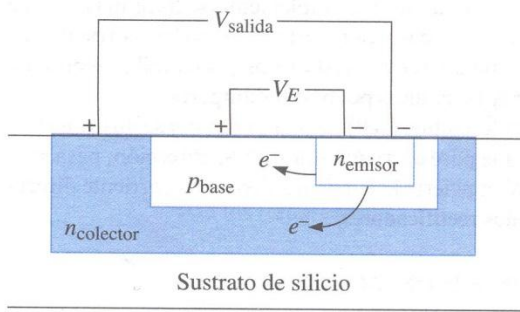
a)



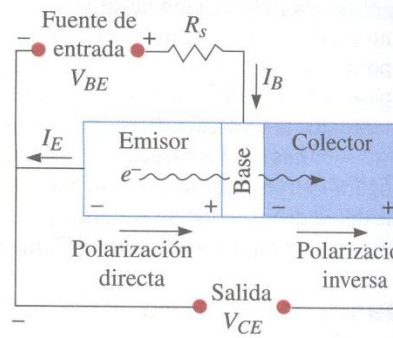
b)



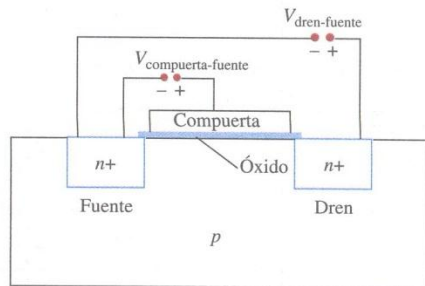
c)



a)



b)



Para los transistores de unión bipolar (n-p-n) se amplifica la señal al producir una polarización directa entre emisor y base mientras que entre la base y el colector se da una polarización inversa. De este modo, los electrones fluyen del emisor a la base directamente y posteriormente pasen en su mayoría de la base al colector gracias al diseño. La polarización inversa acelera los electrones completando el circuito. La corriente en el colector  $I_c$  es:

$$I_c = I_0 \exp\left(\frac{V_E}{B}\right)$$

$V_E$  es el voltaje entre emisor y base.

# Conducción en materiales iónicos

Los portadores de carga son iones y en estos materiales la movilidad de estos portadores se da por

$$\mu = \frac{ZqD}{k_B T}$$
$$\sigma = nZq\mu$$

En el MgO los portadores de carga son los iones  $\text{Mg}^{+2}$ . Estime la movilidad de estos iones y calcule la conductividad eléctrica a  $1800^\circ\text{C}$ . El coeficiente de difusión de los iones  $\text{Mg}^{+2}$  en MgO a  $1800^\circ\text{C}$  es  $10^{-10} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $q=1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ ,  $k_B=1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ . El MgO tiene la estructura del NaCl con parámetro  $a=3.96 \times 10^{-8} \text{ cm}$ .

# Conducción en polímeros

Los polímeros tienen una estructura de banda con una gran brecha de energía, lo cual produce una baja conductividad. Esto se debe a que los electrones de valencia en estos tipos de materiales toman parte en enlaces covalentes. Los polímeros por ello se utilizan en aplicaciones en los cuales se requieren aislamiento eléctrico para evitar cortocircuitos y descargas.

No obstante debido a la baja conductividad, en muchos casos suelen acumular electricidad estática y crean campos electroestáticos que producen daños a los materiales que aíslan debido a las pequeñas descargas contrarias que llegan a causar.

# Dieléctricos

La mayoría de los materiales cerámicos no son conductores de cargas móviles, por lo que no son conductores de electricidad. Cuando son combinados con fuerza, permite usarlos en la generación de energía y transmisión. Por ejemplo, las líneas de alta tensión son generalmente sostenidas por torres de transmisión que contienen discos de porcelana, los cuales son lo suficientemente aislante como para resistir rayos y tienen la resistencia mecánica apropiada como para sostener los cables.

Un buen material dieléctrico es aquel que es capaz de mantener el campo magnético a través de él sin inducir pérdida de energía

Existen tres mecanismos de polarización:

- **Polarización electrónica:** Consiste en la concentración de los electrones en el lado del núcleo más cercano al extremo positivo del campo. Esto produce una distorsión del arreglo electrónico y el átomo actúa como un dipolo temporal inducido. Este efecto, que ocurre en todos los materiales, es pequeño y temporal.
- **Polarización iónica:** Los enlaces iónicos tienden a deformarse elásticamente cuando se colocan en un campo eléctrico debido a las fuerzas que actúan sobre los átomos. En consecuencia la carga se redistribuye dentro del material microscópicamente. Los cationes y aniones se acercan o se alejan dependiendo de la dirección de campo causando polarización y llegando a modificar las dimensiones generales del material.
- **Polarización molecular:** Algunos materiales contienen dipolos naturales, de modo que cuando se les aplica un campo giran, hasta alinearse con él. No obstante, existen algunos materiales como es el caso del titanato de bario, los dipolos se mantienen alineados a pesar de haberse eliminado la influencia del campo externo

Cuando se encuentran entre capas del material conductor, los materiales dieléctricos que se polarizan son capaces de almacenar cargas, esta propiedad se describe mediante dos constantes: constante dieléctrica (relación de la permisividad del material con la permisividad en el vacío) y la resistencia dieléctrica (campo dieléctrico máximo que puede mantener un material entre conductores).

La polarización provoca un desplazamiento y deformación. Al oscilar el campo, el movimiento de las cargas produce calor a veces, lo que se conoce como pérdidas dieléctricas. Estas pérdidas se expresan en diferentes formas: por  $\tan \delta$  o por el factor de calidad  $Q$  ( $\sim 1/\tan \delta$ ).

La constante dieléctrica de un material se determina con

$$C = \frac{k\epsilon_0 A}{t}$$

$\epsilon_0$  es la permisividad del vacío =  $8.85 \times 10^{-12}$  F/m,  $k$  es la constante dieléctrica del material,  $A$  es el área superficial de los electrodos y  $t$  es la distancia entre ellos.  $C$  es la capacitancia del colector y es igual a  $Q/V$ , siendo  $Q$  la carga entre las placas y  $V$  el voltaje aplicado.

La constante dieléctrica depende de la microestructura, la composición, la frecuencia y la temperatura. La polarización dieléctrica ocasionada está dada por

$$P = (k - 1)\epsilon_0 E$$

E es el campo eléctrico aplicado. Esta ecuación aplica en dieléctricos lineales. La cantidad  $k-1$  es conocida también como susceptibilidad dieléctrica  $\chi_e$ .

Los dieléctricos no lineales no muestran una relación lineal entre la polarización y el voltaje aplicado y se conocen también como ferroeléctricos.

Al efecto de deformación ocasionado por la polarización se le conoce como electroestricción (efecto piezoeléctrico generador o inverso); además de darse por cambios en la longitud de los enlaces entre iones, puede ser resultado de la actuación de los átomos como partículas en forma oval en vez de esférica o por distorsión debida a la orientación de los dipolos permanentes de un material. Se da asimismo el efecto inverso: cuando a algunos materiales se les impone un cambio dimensional, ocurre polarización, lo que crea un voltaje o un campo (efecto piezoeléctrico motor o directo). Los materiales que presentan este comportamiento son **piezoeléctricos**.

Los ferroeléctricos son materiales que muestran una polarización espontánea y reversible, pero adicionalmente presentan un ciclo de histéresis, debido a que la polarización inducida no está linealmente relacionada con el campo.

Estos materiales exhiben dominios ferroeléctricos, que son regiones donde se produce una polarización uniforme.

La constante dieléctrica tiene un valor máximo con la temperatura, que es conocida como la temperatura de Curie del material.

Se va a diseñar un condensador de multicapas usando BaTiO<sub>3</sub> con impurezas de SrTiO<sub>3</sub>. La  $k$  del material es de 3000. Calcule la capacitancia de un condensador de multicapas formado por 100 capas en paralelo que usa electrodos de níquel. El área de cada capa es de 10x5 mm y el grueso de las capas es de 10  $\mu\text{m}$ .