

Nombre y apellidos:

Número de matrícula:

- sólo se calificarán los problemas en los que se haya marcado una respuesta. Si la opción elegida es "ninguna de las anteriores, la respuesta correcta es:", la respuesta debe aparecer sobre la línea de puntos inmediatamente a continuación.
- sólo puntuarán las respuestas con un razonamiento matemático, gráfico, etc.
- las respuestas incorrectas no restan puntos
- usar por favor bolígrafo, pluma o rotulador
- usar estas mismas hojas para hacer los cálculos, no usar ningún otro papel
- 60 min, 0.5 puntos cada problema

Las soluciones aparecerán en AulaWeb dentro de los dos días hábiles siguientes a la finalización de la prueba.

Las preactas se publicarán no más tarde del día 20 de julio y la revisión de examen será el 24 de julio a las 10:00 en la sala R1.

1. Un cable está compuesto de fibras de dos materiales isótropos diferentes, A y B, alineadas todas paralelas entre sí y paralelas al eje del cable. Los módulos de Young de los materiales son $E_A = 1.2 \times 10^9$ Pa y $E_B = 3.2 \times 10^9$ Pa, y sus fracciones volumétricas son $V_A = 0.23$ y $V_B = 0.77$. El material A puede soportar una tensión mecánica longitudinal máxima de $\tau_{\max A} = 4.2 \times 10^8$ Pa (es decir, se rompe para tensiones de tracción mayores que ésta), y B soporta como máximo $\tau_{\max B} = 5.5 \times 10^8$ Pa. El área transversal total del cable es $S = 0.01$ m². Determinar qué fuerza máxima de tracción (en la dirección de las fibras) puede soportar el cable sin romperse.

- $4.21 \cdot 10^5$ N
- $2.39 \cdot 10^6$ N
- $4.71 \cdot 10^5$ N
- $1.32 \cdot 10^7$ N
- $7.83 \cdot 10^6$ N
- ninguna de las anteriores, la respuesta correcta es:.....

Sol.: en la situación descrita en el enunciado, los dos componentes se encuentran en condiciones de isodeformación. Por lo tanto se cumple:

$$\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_C \Rightarrow \frac{\tau_A}{E_A} = \frac{\tau_B}{E_B} = \frac{\tau_C}{E_C} = \varepsilon_C \quad (1) \quad \text{(el subíndice C se refiere al compuesto)}$$

donde el módulo del compuesto en isodeformación es:

$$E_c = V_A \cdot E_A + V_B \cdot E_B \quad E_c = 2.74 \times 10^9 \text{ Pa}$$

De (1):

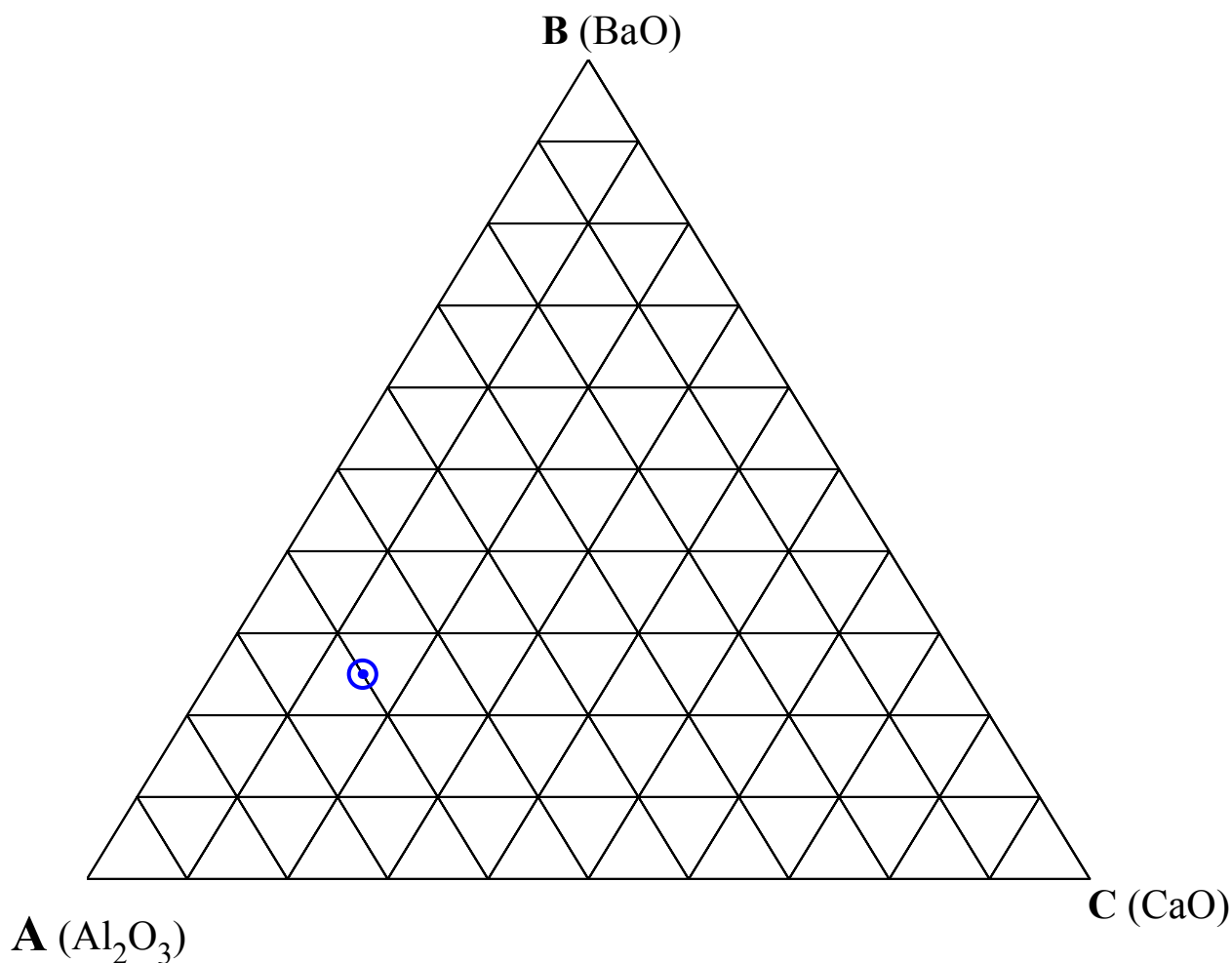
$$\tau_A = \varepsilon_A E_A = \varepsilon_C E_A = \frac{F}{SE_C} E_A \Rightarrow F = \frac{\tau_A SE_C}{E_A}$$

La fuerza máxima, suponiendo que el componente A falla primero, se obtiene sustituyendo $\tau_{\max A}$ en la expresión anterior. Para B, la expresión es análoga. El cable fallará cuando se alcance la carga límite más baja de las dos, bien la de A o la de B:

$$F_{\max} = \min \left(\frac{\tau_{\max A} \cdot S \cdot E_c}{E_A}, \frac{\tau_{\max B} \cdot S \cdot E_c}{E_B} \right) \quad F_{\max} = 4.709 \times 10^6 \text{ N}$$

2. Determinar la composición molar (fracciones molares de A, B y C) del punto indicado en el diagrama triangular. El diagrama triangular es en base másica (fracciones másicas).

Usar las masas atómicas: $M_{wBa} = 137$, $M_{wO} = 16$, $M_{wCa} = 40$, $M_{wAl} = 27$.



- $x_A = 0.317$, $x_B = 0.106$, $x_C = 0.577$
- $x_A = 0.207$, $x_B = 0.415$, $x_C = 0.378$
- $x_A = 0.577$, $x_B = 0.160$, $x_C = 0.263$
- $x_A = 0.206$, $x_B = 0.046$, $x_C = 0.749$
- $x_A = 0.167$, $x_B = 0.223$, $x_C = 0.610$
- ninguna de las anteriores, la respuesta correcta es:.....

Solución: la composición másica se lee del diagrama:

$$x_A = 0.6 \qquad x_B = 0.25 \qquad x_C = 1 - x_A - x_B \qquad x_C = 0.15$$

Las masas molares de A, B y C son:

$$Mw_A = 2Mw_{Al} + 3Mw_O$$

$$Mw_B = Mw_{Ba} + Mw_O$$

$$Mw_C = Mw_{Ca} + Mw_O$$

$$Mw_A = 102 \text{ kg/kmol A}$$

$$Mw_B = 153 \text{ kg/kmol B}$$

$$Mw_C = 56 \text{ kg/kmol C}$$

Por tanto las fracciones molares (X_A , X_B , X_C):

$$X_A = \frac{\frac{x_A}{Mw_A}}{\frac{x_A}{Mw_A} + \frac{x_B}{Mw_B} + \frac{x_C}{Mw_C}}$$

$$X_B = \frac{\frac{x_B}{Mw_B}}{\frac{x_A}{Mw_A} + \frac{x_B}{Mw_B} + \frac{x_C}{Mw_C}}$$

$$X_C = 1 - X_A - X_B$$

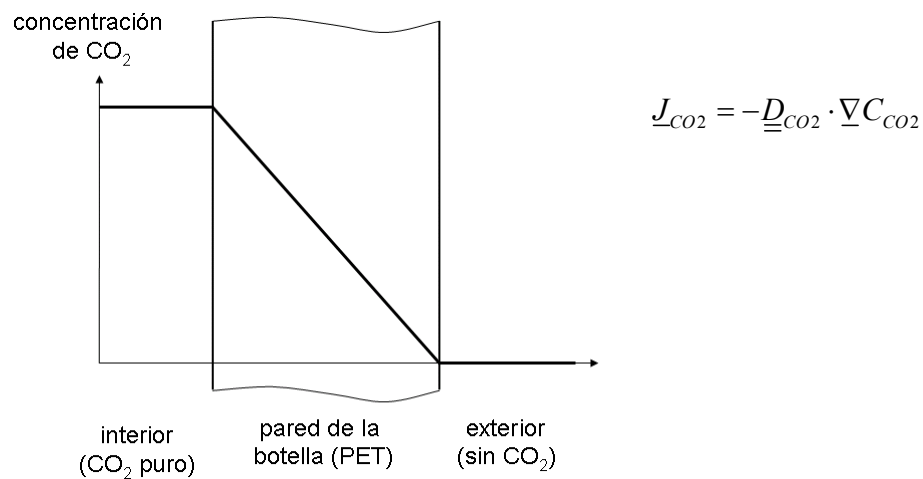
$$X_A = 0.577$$

$$X_B = 0.16$$

$$X_C = 0.263$$

3. Una botella de PET (considerado isótropo) contiene CO₂ puro a una presión P = 1.2 bar y una temperatura de T = 298 K. El exterior de la botella es aire en el que la concentración de CO₂ es despreciable. El espesor de la pared de la botella es $\delta = 1.6 \times 10^{-3}$ m y la difusividad del CO₂ a través del PET es de

$D_{CO_2} = 1.2 \times 10^{-11}$ m²/s. Se supone que la concentración del CO₂ (en kg/m³) en la superficie interior de la pared es igual a la concentración de CO₂ puro en el interior y que la concentración de CO₂ varía linealmente a través del espesor de la pared (ver figura). El CO₂ se considera gas ideal. Calcular cuánto CO₂ pierde la botella por unidad de superficie (en kg de CO₂/m².s) de pared, si la difusión obedece la ley constitutiva de Fick:



- $1.62 \cdot 10^{-8}$ kg de CO₂ /m².s
- $1.376 \cdot 10^{-8}$ kg de CO₂ /m².s
- $2.08 \cdot 10^{-8}$ kg de CO₂ /m².s
- $2.091 \cdot 10^{-6}$ kg de CO₂ /m².s
- $8.183 \cdot 10^{-7}$ kg de CO₂ /m².s
- ninguna de las anteriores, la respuesta correcta es:.....

Sol.: si consideramos un eje coordenado cuyo sentido positivo sea desde el interior hacia el exterior de la botella, a lo largo de este eje, puesto que el material de la pared es isótropo, la variación de la concentración a través de la pared es lineal y la concentración exterior de CO₂ es nula, la ley constitutiva resulta en:

$$J_{CO_2} = -D_{CO_2} \nabla C_{CO_2} = -D_{CO_2} \frac{C_{CO_2,ext} - C_{CO_2,int}}{\delta} = D_{CO_2} \frac{C_{CO_2_interior}}{\delta}$$

donde el flujo positivo indica que el CO₂ fluye hacia el exterior de la botella (sentido positivo del eje coordenado, de mayor a menor concentración). La concentración (kg/m³) en el interior, que en este caso es igual a la densidad másica, se obtiene directamente de la ecuación de estado del gas ideal (teniendo en cuenta que 1 bar = 101325 Pa):

$$R = 8.314 \times 10^3 \text{ J/kmol.K} \quad C_{CO_2_interior} = \frac{P \cdot 101325 \cdot M_{wCO_2}}{R \cdot T}$$

La pérdida por unidad de superficie es directamente el flujo (kg de CO₂/m².s). Por tanto:

$$J_{CO_2} = D_{CO_2} \cdot \frac{C_{CO_2_interior}}{\delta} \quad J_{CO_2} = 1.62 \times 10^{-8} \text{ kg/m}^2.s$$

4. Una resistencia está fabricada con un material semiconductor. Su resistencia eléctrica se mide a dos temperaturas, $T_1 = 298 \text{ K}$ y $T_2 = 456 \text{ K}$, y se obtienen los valores $R_1 = 727 \text{ } \Omega$ y $R_2 = 333 \text{ } \Omega$, respectivamente. Determinar qué valor de la resistencia se medirá a $T_3 = 330 \text{ K}$.

- 432.9 Ω
- 315.8 Ω
- 561.0 Ω
- 360.5 Ω
- 584.3 Ω
- ninguna de las anteriores; la respuesta correcta es:.....

Sol.: la resistividad eléctrica (igual que su inversa, la conductividad eléctrica) de un material semiconductor varía con la temperatura según una función exponencial, tanto si es intrínseco como si es extrínseco. Puesto que la resistencia es proporcional a la resistividad, la resistencia también variará exponencialmente con la temperatura:

$$R(T) \propto \rho(T) \frac{L}{S} \propto \frac{1}{\sigma(T)} \frac{L}{S} \propto \frac{1}{\sigma_0 e^{-\frac{B}{T}}} \frac{L}{S}$$

En esta expresión σ_0 y B son constantes características del material del que está hecho la resistencia. Podemos determinar B a partir de los datos (resistencias dadas a T_1 y T_2):

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} = \frac{\sigma_0 e^{-\frac{B}{T_2}}}{\sigma_0 e^{-\frac{B}{T_1}}} = e^{B(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2})}$$

despejando B resulta: $B = \frac{\ln\left(\frac{R_1}{R_2}\right)}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}$ $B = 671.514$ **y sustituyendo en la relación R_3/R_1 :** $R_3 = R_1 \cdot e^{B \cdot \frac{T_1 - T_3}{T_3 \cdot T_1}}$

$R_3 = 584.3$ W

5. Una pieza cúbica maciza de lado $L = 0.02$ m de un material cerámico monoclinico está cortada de modo que sus aristas son paralelas a las direcciones de los ejes cartesianos convencionales. El coeficiente de dilatación lineal α (tensor de 2° orden, simétrico) de este material, expresado en forma de matriz es:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 4.1 \times 10^{-5} & 0 & 2.2 \times 10^{-5} \\ 0 & 3.7 \times 10^{-5} & 0 \\ 2.2 \times 10^{-5} & 0 & 2.2 \times 10^{-5} \end{pmatrix} \text{ K}^{-1}$$

Determinar la variación porcentual de volumen que sufre la pieza si su temperatura aumenta de $T_1 = 298$ K a $T_2 = 456$ K, (suponer siempre pequeñas deformaciones).

- 2.12 %
- 4.2 %
- 1.58 %
- 2.68 %
- 5.4 %
- ninguna de las anteriores, la respuesta correcta es:.....

Sol.: La variación relativa en volumen, sea cual sea la forma del objeto, es la traza (suma de los elementos de la diagonal) del tensor deformación, que se calcula según la ley constitutiva:

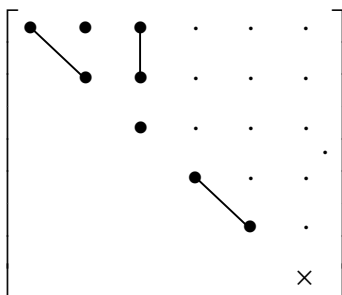
$$\underline{\underline{\varepsilon}} = \Delta T \underline{\underline{\alpha}} \qquad \frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{ii} = \Delta T \alpha_{ii}$$

sustituyendo los datos, resulta: $(T_2 - T_1) \cdot (\alpha_{1,1} + \alpha_{2,2} + \alpha_{3,3}) \cdot 100 = 1.58$ %

6. Un material cerámico hexagonal presenta, entre otros, los siguientes valores de la rigidez elástica: $c_{11} = 4.1 \times 10^{10}$ Pa y $c_{12} = -1.2 \times 10^{10}$ Pa. Determinar el valor del elemento c_{2112} del tensor de rigidez elástica.

- $1.51 \cdot 10^{10}$ Pa
- $2.65 \cdot 10^{10}$ Pa
- $3.51 \cdot 10^{10}$ Pa
- $5.30 \cdot 10^{10}$ Pa
- $4.36 \cdot 10^{10}$ Pa
- ninguna de las anteriores; la respuesta correcta es:

Sol.: El material es hexagonal y por tanto la estructura de su matriz de rigidez elástica es:



El elemento pedido es en notación de Voigt : $c_{2112} = c_{66}$ (para la rigidez c , no hay que multiplicar por 2 ni por 4)

A la vista de la estructura de la propiedad, el elemento c_{66} del tensor rigidez elástica viene designado con una "x", que corresponde a:

$$c_{66} = \frac{1}{2}(c_{11} - c_{12})$$

$$c_{66} = \frac{c_{11} - c_{12}}{2} \quad c_{66} = 2.65 \times 10^{10} \quad \text{Pa}$$

7. Calcular la densidad atómica lineal (átomos/m) en la dirección [1 1 2] de un material de estructura ortorrómbica C (centrada en el pinacoide C o centrada en las bases C) con parámetros de red:

$$a = 1.02 \times 10^{-9} \text{ m}, b = 1.78 \times 10^{-9} \text{ m y } c = 2.56 \times 10^{-9} \text{ m}.$$

- 4.086×10^8 átomos/m
- 3.626×10^8 átomos/m
- 2.428×10^8 átomos/m
- 2.575×10^8 átomos/m
- 2.662×10^8 átomos/m
- ninguna de las anteriores; la respuesta correcta es:.....

Sol.: la dirección [1 1 2] (con las componentes siempre medidas en unidades de los parámetros de red o lados de la celda) es la de un vector que parte del origen y pasa por el átomo de coordenadas (1, 1, 2) y por el átomo de coordenadas (1/2, 1/2, 1), como se indica en la figura:

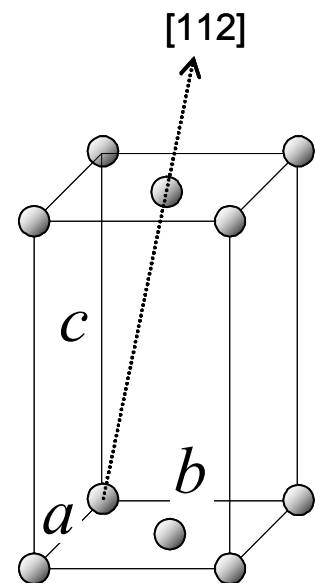
Un segmento desde el origen hasta dicho átomo en la cara superior de la celda ortorrómbica C tiene una longitud de:

$$L = \sqrt{c^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2 + \left(\frac{b}{2}\right)^2}$$

$$L = 2.76 \times 10^{-9} \text{ m}$$

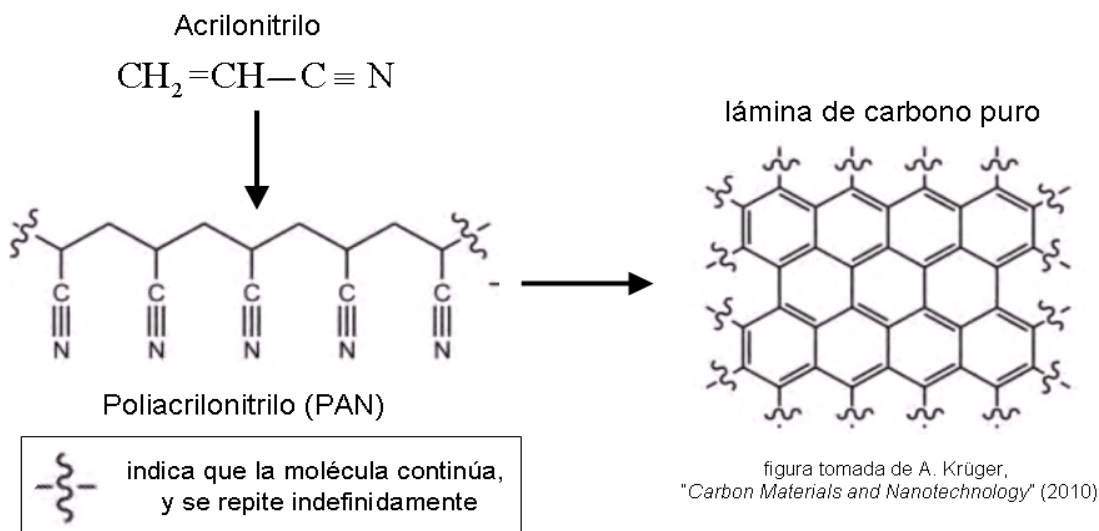
Este segmento contiene dos medios átomos, medio del que está en el origen, medio del que está en el centro de la cara C superior. Por tanto $n_{\text{átomos}} = 1$ átomos y la densidad lineal es:

$$\frac{n_{\text{átomos}}}{L} = 3.626 \times 10^8 \text{ átomos/m}$$



8. La mayoría de las fibras de carbono usadas en compuestos están formadas por láminas de carbono puro que se obtienen por carbonización del poliacrilonitrilo (PAN), que a su vez se obtiene polimerizando el acrilonitrilo (A) (primer paso en la figura). En la carbonización (segundo paso en la figura) se obtienen las láminas de carbono puro y se pierde todo el nitrógeno y todo el hidrógeno originalmente contenidos en el acrilonitrilo. El precio del acrilonitrilo es de $p_A = 0.89 \text{ €/kg}$. Determinar el coste del acrilonitrilo necesario para fabricar 1 kg de fibra de carbono, suponiendo que ambos pasos tienen un rendimiento del 100% (es decir, todos los reactivos se convierten íntegramente en productos en los dos pasos).

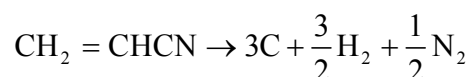
- 0.63 €/kg
- 0.82 €/kg
- 1.53 €/kg
- 0.18 €/kg
- 1.31 €/kg
- ninguna de las anteriores; la respuesta correcta es:.....



Sol.: de acuerdo con los pasos indicados, la conversión del acrilonitrilo en carbono puro puede escribirse como una única reacción global en la que cada molécula de acrilonitrilo produce tres átomos de carbono:



o bien:



Según esta reacción global, cada kmol de acrilonitrilo (A) produce tres kmol de carbono. Un kmol

de carbono son $M_{wC} = 12$ kg de carbono, un kmol de A son $3M_{wC} + 3M_{wH} + M_{wN} = 53$ kg de A.

Por la estequiometría 1:3, la fabricación de 1 kg de C requiere:

$$\frac{1}{M_{wC}} \cdot \frac{1}{3} \cdot (3M_{wC} + 3M_{wH} + M_{wN}) = 1.472 \quad \text{kg de A}$$

y su coste es: $\frac{1}{M_{wC}} \cdot \frac{1}{3} \cdot (3M_{wC} + 3M_{wH} + M_{wN}) \cdot p_A = 1.31 \quad \text{€/kg}$

Problema 1

Nombre:

Número de matrícula:

Como es sabido, la conductividad de los semiconductores depende de la temperatura y de la presencia de impurezas. Se dispone de un determinado semiconductor intrínseco formado por átomos de un elemento X cuya configuración electrónica es similar a la del grupo IV. Con el objeto de aumentar su conductividad eléctrica, una oblea de este material puro (X) se dopa con átomos de un elemento E .

Determinar:

- La densidad volumétrica del semiconductor intrínseco X (ρ_X en $\frac{kg}{m^3}$) sabiendo que su estructura cristalina es como la del silicio.
- La temperatura a la que una millonésima parte (10^{-6}) de los átomos del semiconductor X se encuentran ionizados.
- La concentración de portadores intrínsecos, n_i ($\frac{portadores}{cm^3}$), a 323K.
- El grupo de la tabla periódica al que podría pertenecer el elemento E , si cuando el semiconductor X se dopa con $5 \times 10^{16} \frac{átomos\ de\ E}{cm^3}$ el valor de la conductividad, medido a 323K, es aproximadamente $1.4 \times 10^3 (\Omega \cdot m)^{-1}$. Suponer que los átomos de la impureza están totalmente ionizados.
- La contribución de los portadores minoritarios a la conductividad del semiconductor dopado a esa temperatura ($\frac{\sigma_{minoritarios}}{\sigma_{minoritarios} + \sigma_{mayoritarios}} \times 100$)

Datos:

$$M_{wX} = 60 \frac{kg}{kmol} \quad R_X = 0.145\ nm$$

Utilizar exclusivamente las gráficas que se adjuntan, **indicando las lecturas realizadas sobre las gráficas.**

Observar que en las gráficas hay escalas lineales y escalas logarítmicas.

(3 puntos, 45 minutos)

Figura 1

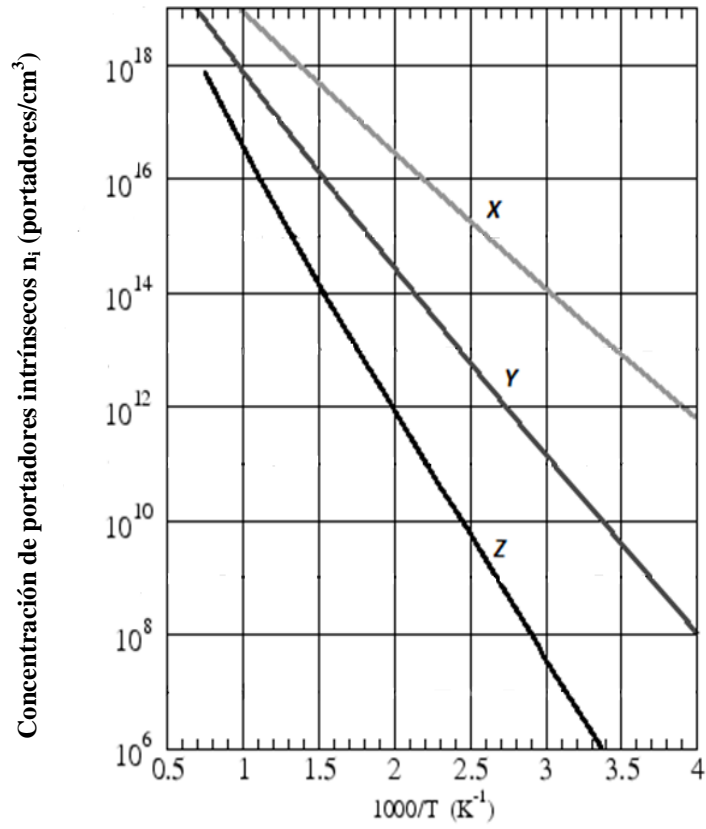
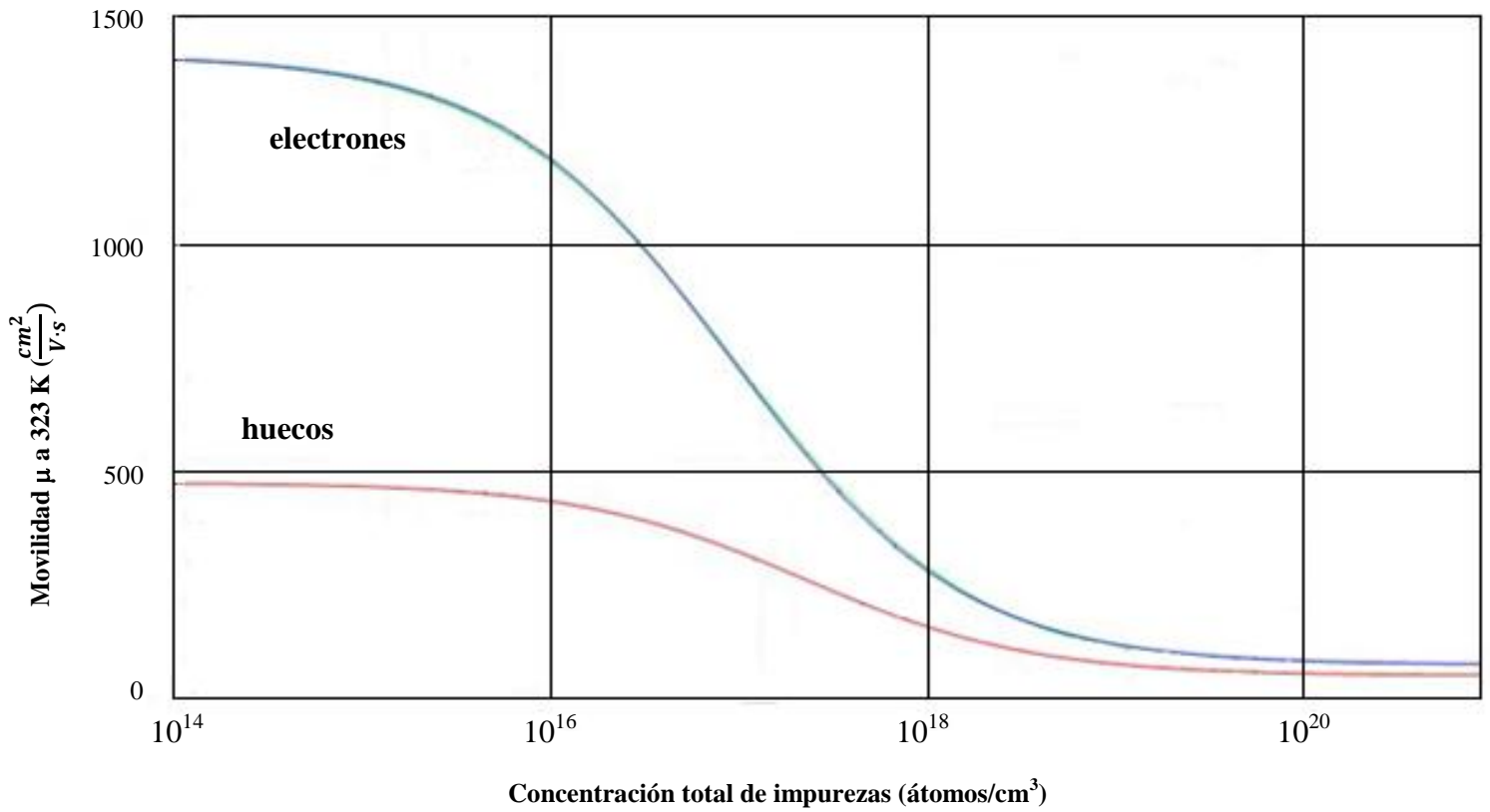


Figura 2

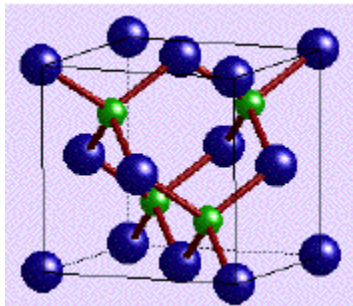


Solución:

Determinar:

- **La densidad volumétrica del semiconductor intrínseco X (ρ_X en $\frac{kg}{m^3}$) sabiendo que su estructura cristalina es como la del silicio.**

Teniendo en cuenta que la estructura cristalina de X tipo silicio (ver 08_01_01.pdf, diapositiva nº14) es:



$$V = a^3$$

$$\text{siendo } a = \frac{8R}{\sqrt{3}} = \frac{8 \times 0.145 \times 10^{-9}}{\sqrt{3}} = 6.697 \times 10^{-10} m$$

$$V = a^3 = 3 \times 10^{-28} m^3$$

$$m = 8 \text{ átomos} \times \frac{60 \text{ kg}}{1 \text{ kmol}} \times \frac{1 \text{ kmol}}{6.023 \times 10^{26} \text{ átomos}} = 7.97 \times 10^{-25} \text{ kg}$$

$$\rho_X = \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} = 2656.5 \frac{kg}{m^3}$$

- **La temperatura a la que una millonésima parte de los átomos del semiconductor X se encuentran ionizados.**

La Figura 1 representa la concentración de portadores intrínsecos, n_i , en función de la temperatura. Puesto que en un semiconductor intrínseco el número de portadores

$$n_i = n_{\text{electrones}} = n_{\text{huecos}} = n_{\text{átomos ionizados}}$$

se trata de encontrar la temperatura a la que

$$n_i = \frac{\text{portadores}}{cm^3} = \frac{\text{átomos ionizados}}{cm^3} = \frac{1}{10^6} \times \frac{\text{átomos totales}}{cm^3}$$

El número de átomos totales de X por cm^3 (base de cálculo una celdilla):

$$\frac{\text{átomos de X}}{cm^3} = \frac{8 \text{ átomos}}{V} = \frac{8 \text{ átomos}}{3 \times 10^{-22} cm^3} = 2.6 \times 10^{22} \frac{\text{átomos}}{cm^3}$$

Por lo tanto la concentración de portadores intrínsecos (átomos ionizados) será:

$$n_i = \frac{1}{10^6} \times \frac{\text{átomos totales}}{cm^3} = 2.6 \times 10^{16} \frac{\text{átomos ionizados}}{cm^3}$$

que por la lectura en la gráfica de la figura 1 corresponde a una temperatura de **500K**

(entrando con ordenada $2.6 \times 10^{16} \frac{\text{portadores}}{cm^3}$, lectura en la recta de X: $abscisa 2 = \frac{1000}{T} \Rightarrow$

$T = 500K$)

- **La concentración de portadores intrínsecos, n_i ($\frac{\text{portadores}}{\text{cm}^3}$), a 323K.**

Se lee directamente en la Figura 1 (gráfica de X):

$$\text{entrando con abscisa: } \frac{1000}{T} = \frac{1000}{323} = 3.09 \approx \mathbf{3.1}$$

$$\text{ordenada: } 5.41 \times 10^{13} \frac{\text{portadores}}{\text{cm}^3}$$

- **El grupo de la tabla periódica al que podría pertenecer el elemento E, si cuando el semiconductor X se dopa con $5 \times 10^{16} \frac{\text{átomos de E}}{\text{cm}^3}$ el valor de la conductividad, medido a 323K, es aproximadamente $1.4 \times 10^3 (\Omega \cdot m)^{-1}$. Suponer que los átomos de la impureza están totalmente ionizados.**

La conductividad de un semiconductor extrínseco (dopado) se determina:

$$\sigma_{\text{semiconductor extrínseco}} = \sigma_{\text{portadores mayoritarios}} + \sigma_{\text{portadores minoritarios}} \approx \sigma_{\text{portadores mayoritarios}}$$

$$\text{semiconductor tipo } n \Rightarrow \text{portadores mayoritarios} = \text{electrones} \Rightarrow$$

$$\sigma_{\text{semiconductor extrínseco}} = \sigma_{\text{electrones}} = n_n q \mu_n$$

$$\text{semiconductor tipo } p \Rightarrow \text{portadores mayoritarios} = \text{huecos} \Rightarrow$$

$$\sigma_{\text{semiconductor extrínseco}} = \sigma_{\text{huecos}} = p_p q \mu_p$$

En cualquier caso (n o p), conocidos el valor de la conductividad ($1.4 \times 10^3 (\Omega \cdot m)^{-1}$), el valor de q ($1.6 \times 10^{-19} C$) y las movilidades (μ_n o μ_p que se determinan por lectura en la Figura 2), la única incógnita es el número de portadores mayoritarios: p_p o n_n

Lecturas de movilidades:

$$\text{abscisas: concentración total de impurezas} = 5 \times 10^{16} \frac{\text{átomos de E}}{\text{cm}^3}$$

$$\text{ordenadas: } \mu_n = 883 \frac{\text{cm}^2}{V \cdot s} \text{ y } \mu_p = 367 \frac{\text{cm}^2}{V \cdot s}$$

Si el semiconductor es tipo n :

$$\text{semiconductor tipo } n \Rightarrow \sigma_{\text{semiconductor extrínseco}} = n_n q \mu_n \Rightarrow n_n = \frac{\sigma_{\text{semiconductor extrínseco}}}{q \mu_n}$$

$$= \frac{1.4 \times 10^3}{1.6 \times 10^{-19} \times 883 \times 10^{-4}} = 9.91 \times 10^{22} \frac{\text{electrones}}{\text{m}^3} = 9.91 \times 10^{16} \frac{\text{electrones}}{\text{cm}^3}$$

Como la relación entre el número de electrones y el número de átomos de E es:

$$\frac{\text{electrones}}{\text{átomos de E}} = \frac{9.91 \times 10^{16}}{5 \times 10^{16}} = 1.98 \approx 2$$

\Rightarrow **E es un átomo del grupo VI**: cada átomo de impureza aporta 2 electrones

La posibilidad de que el semiconductor sea tipo p se descarta ya que:

$$\begin{aligned} \text{semiconductor tipo p} &\Rightarrow \sigma_{\text{semiconductor extrínseco}} = p_p q \mu_p \Rightarrow p_p = \frac{\sigma_{\text{semiconductor extrínseco}}}{q \mu_p} \\ &= \frac{1.4 \times 10^3}{1.6 \times 10^{-19} \times 367 \times 10^{-4}} = 2.38 \times 10^{23} \frac{\text{huecos}}{\text{m}^3} = 2.38 \times 10^{17} \frac{\text{huecos}}{\text{cm}^3} \end{aligned}$$

Relación entre número de huecos y número de átomos:

$$\frac{\text{huecos}}{\text{átomos de E}} = \frac{2.38 \times 10^{17}}{5 \times 10^{16}} = 4.76 \approx 5 \Rightarrow \text{No existe E (se trataría de un átomo con 5 huecos)}$$

- **La contribución de los portadores minoritarios a la conductividad del semiconductor dopado a esa temperatura** $\left(\frac{\sigma_{\text{minoritarios}}}{\sigma_{\text{minoritarios}} + \sigma_{\text{mayoritarios}}} \times 100 \right)$

Simplemente sustituyendo en la expresión anterior:

$$\frac{\sigma_{\text{huecos}}}{\sigma_{\text{huecos}} + \sigma_{\text{electrones}}} \times 100 \approx \frac{\sigma_{\text{huecos}}}{\sigma_{\text{electrones}}} \times 100 = \frac{p_n q \mu_p}{1.4 \times 10^3} = \frac{p_n \times 1.6 \times 10^{-19} \times 367 \times 10^{-4}}{1.4 \times 10^3}$$

y teniendo en cuenta que:

$$p_n = \frac{n_i^2}{n_n} = \frac{(5.41 \times 10^{13})^2}{2 \times 5 \times 10^{16}} = 2.93 \times 10^{10} \frac{\text{huecos}}{\text{cm}^3}$$

$$\frac{\sigma_{\text{huecos}}}{\sigma_{\text{huecos}} + \sigma_{\text{electrones}}} \times 100 \approx \frac{2.93 \times 10^{10} \times 1.6 \times 10^{-19} \times 367 \times 10^{-4}}{1.4 \times 10^3} \times 100 = 1.2 \times 10^{-5}$$

Problema 2

Nombre:

Número de matrícula:

Un material cerámico puede cristalizar en las siguientes tres formas cristalinas, A, B y C que se diferencian en la posición de los cationes:

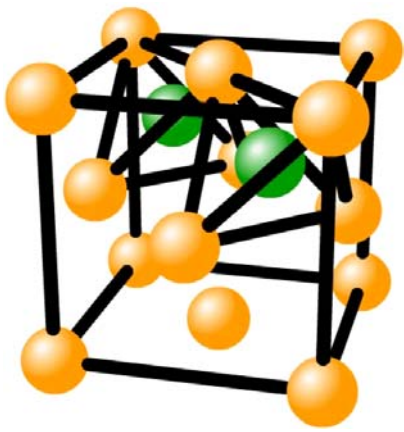
- forma cristalina A; red: cúbica P, base: cuatro aniones (X) en $(0, 0, 0)$, $(0.5, 0.5, 0)$, $(0.5, 0, 0.5)$ y $(0, 0.5, 0.5)$; dos cationes (Y) en $(0.25, 0.25, 0.75)$, $(0.75, 0.75, 0.75)$.
- forma cristalina B; red: cúbica P, base: cuatro aniones (X), mismas coordenadas que en la forma A; dos cationes (Y) en $(0.25, 0.25, 0.75)$, $(0.75, 0.75, 0.25)$.
- forma cristalina C; red: cúbica P, base: cuatro aniones (X), mismas coordenadas que en la forma A; dos cationes (Y) en $(0.75, 0.25, 0.75)$, $(0.75, 0.75, 0.75)$.

En la práctica, la forma cristalina más estable (entre las tres alternativas A, B y C), y que aparece espontáneamente en la naturaleza y en el laboratorio, es aquella en la que la distancia entre iones del mismo tipo es la mayor posible.

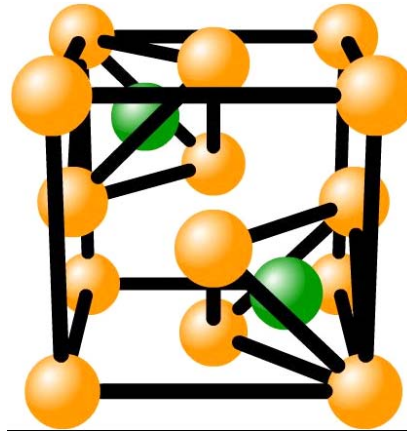
Todos los iones se consideran esféricos, de radios r_X y r_Y y masas atómicas Mw_X y Mw_Y y los cationes son tangentes a los aniones que están más próximos a ellos. En función de las variables anteriores determinar:

1. fórmula estequiométrica del material cerámico (en la fórmula usar X e Y como símbolos químicos de los aniones y cationes respectivamente).
2. densidad (kg/m^3) de las formas A, B y C.
3. clase cristalográfica de la forma A,
4. clase cristalográfica de la forma B,
5. clase cristalográfica de la forma C,
6. cuál de las tres formas será la más estable.

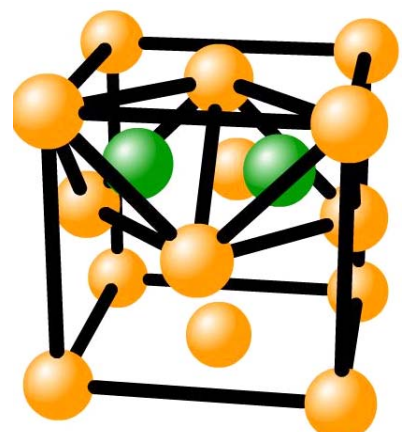
Sol.: fórmula estequiométrica: la celda unitaria de las tres formas se obtiene colocando la base (4 aniones y 2 cationes, en total 6 átomos) en cada uno de los puntos de la red. La red cúbica P (primitiva) contiene un punto de red por celda. Por tanto, las estructuras que se obtienen presentan este aspecto:



Forma cristalina A



Forma cristalina B



Forma cristalina C

En esta figura los aniones se han representado como esferas naranjas y los cationes como esferas verdes. Las figuras incluyen los 2 cationes de la base, los 4 aniones de la base (por tanto, una base completa), y además otros 10 aniones de celdas vecinas (copias de la celda original) de modo que se pueda apreciar claramente la simetría de la celda.

Las líneas gruesas son sólo una ayuda para la visualización de las estructuras. También sirven para que se observe más claramente que los cationes ocupan dos de los ocho huecos tetraédricos definidos por los aniones en la celda.

En los tres casos, la fórmula y la estequiometría son las mismas. Puesto que la base contiene 4 aniones (X) y dos cationes (Y), la fórmula estequiométrica es Y_2X_4 , o bien YX_2 .

Densidad: en los tres casos, los cationes ocupan huecos tetraédricos, es decir, cada uno de ellos es tangente a los cuatro aniones más inmediatos, y ocupa el centro del tetraedro definido por estos cuatro aniones. En las figuras los radios de las esferas que representan los iones se han reducido de tamaño por claridad; en la realidad, las esferas verdes son tangentes a las cuatro naranjas que las rodean. Por tanto, las dimensiones de la celda y la densidad son las mismas para las tres formas.

En cualquiera de las tres estructuras, pero especialmente en la B, se aprecia claramente que la distancia entre el centro de un anión y el centro de un catión es la cuarta parte de la diagonal de la celda cúbica, igual que ocurre en las estructuras tipo de la blenda o de la fluorita. En consecuencia, llamando "a" al parámetro de red (arista del cubo):

$$\sqrt{3}a = 4(r_x + r_y) \Rightarrow a = \frac{4(r_x + r_y)}{\sqrt{3}}$$

el volumen de la celda es:

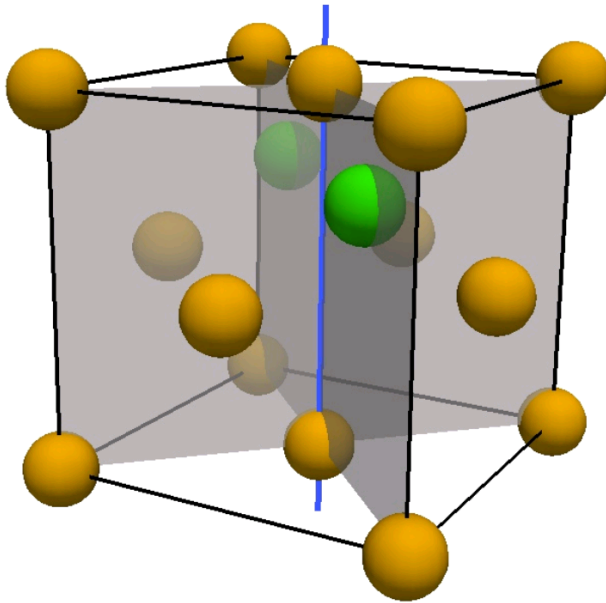
$$V = a^3 = \left(\frac{4(r_x + r_y)}{\sqrt{3}} \right)^3$$

Dado que en la celda unidad hay cuatro aniones y dos cationes, la densidad en kg/m^3 de las tres formas del material es:

$$\rho = \frac{4Mw_X + 2Mw_Y}{\left(\frac{4(r_X + r_Y)}{\sqrt{3}}\right)^3} m_{uma}$$

donde m_{uma} es la unidad atómica de masa.

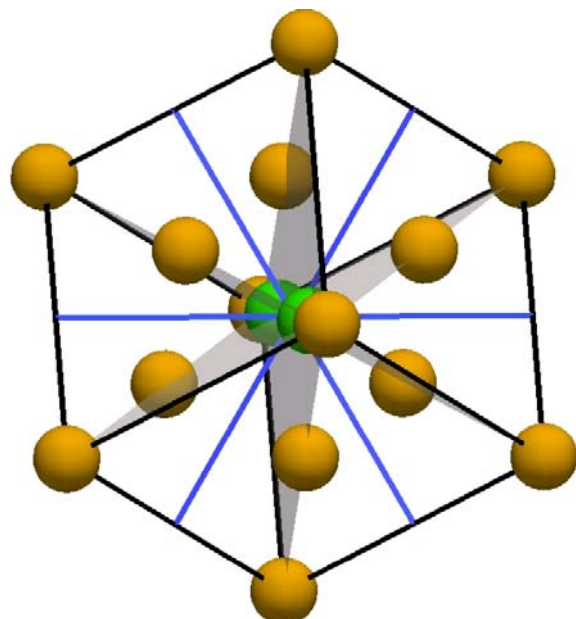
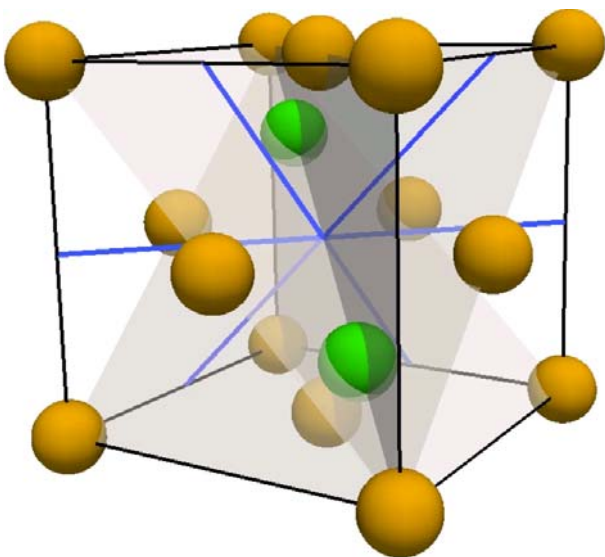
Clases cristalográficas: la estructura A tiene planos de simetría como el (1 1 0), otra forma de planos de simetría como el (-1 1 0) y ejes binarios en la dirección [0 0 1]. Perteneció por tanto al sistema ortorrómbico y en particular a la clase $mm2$.



Planos y eje binario de la forma cristalina A.

La estructura B tiene un eje que es ternario y ternario de inversión en la dirección [1 1 1], planos de simetría como el (1 1 0), 3 planos de simetría: (0 -1 1), (-1 0 1) y (-1 1 0) y 3 ejes binarios en las direcciones [0 -1 1], [-1 0 1] y [-1 1 0]. Perteneció por tanto al sistema trigonal y en particular a la clase

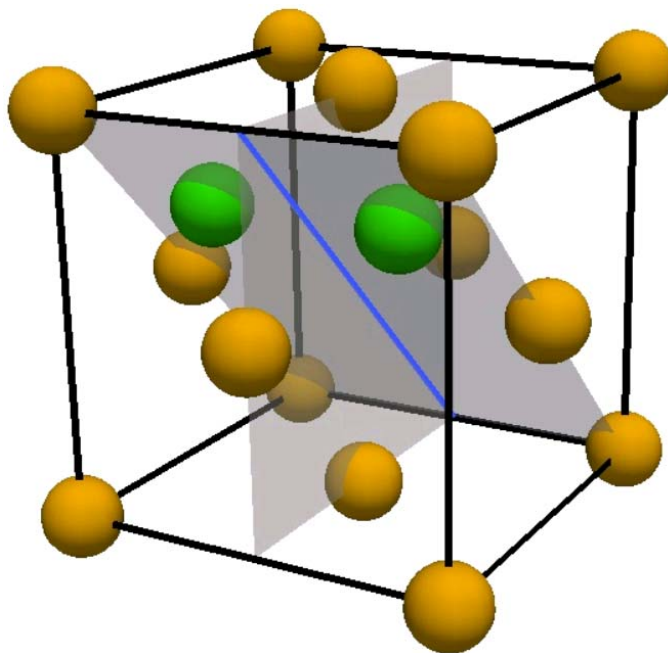
$\bar{3}m$



Planos y ejes binario de la forma cristalina B. El eje ternario no está representado. El eje ternario pasa por los centros de los dos cationes.

Vista a lo largo del eje ternario (diagonal de la celda cúbica) de la forma cristalina B.

La estructura C tiene planos de simetría como el (2 0 0), otra forma de planos de simetría como el (0 1 1) y ejes binarios en la dirección [1 1 0]. Pertenece por tanto al sistema ortorrómbico y en particular a la clase $mm2$, igual que la estructura A.



Planos y eje binario de la forma cristalina C.

En cuanto a la estabilidad de las tres formas, la disposición y por tanto las distancias entre los aniones son las mismas en las tres estructuras. Por tanto, si consideramos sólo los aniones no hay diferencias de estabilidad entre las tres formas.

Sin embargo, los cationes más próximos entre sí (los marcados en verde en las figuras) están separados por media arista de celda en la forma C, por media diagonal de cara de celda en la forma A y por media diagonal de celda en la forma B. Esta última distancia es la mayor de las tres (diagonal de la celda > diagonal de la cara de la celda > lado de la celda).

Por tanto, la forma B es la más estable.