

Posición de un punto de la red: $\vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$ • Volumen de la celda unidad: $V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}|$ • Distancia entre planos (SC, BCC, FCC): $d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ • Red Ortorrómbica: $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}}}$ • **Estructuras cristalinas simples.** i) NaCl (FCC). Cl: $000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ • Na: $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}, 00\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}00$ • ii) CsCl (SC) Cs: 000 • Cl: $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ • iii) hcp: Factor de empaquetamiento: $c/a = (8/3)^{1/2}$ • iv) Estructura diamante (FCC). $000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ • v) ZnS (2FCC). Zn: $000, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ • S: $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}, \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}, \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$ • Volúmenes celdas primitivas: i) SC: $V = a^3$ ii) BCC: $V = a^3/2$ iii) FCC: $V = a^3/4$ • Coeficiente de dilatación lineal: $L' = L_0(1 + \alpha\Delta T)$

TEMA 2. DIFRACCIÓN.

Ley de Bragg: $2d \sin \theta = n\lambda$, intensidad máxima $n = 1$ • Red Real $\rightarrow a$, Red Recíproca $\rightarrow 2\pi/a$ • Número de electrones en la red periódica: $n(\vec{r}) = \sum_G n_G \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r})$ con $n_G = \frac{1}{V_c} \int_c dV n(\vec{r}) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r})$ • Vector de la red recíproca: $G = hb_1 + kb_2 + lb_3$ con $b_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$, $b_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$, $b_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3}$ • $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ • Amplitud de Scattering: $F = \sum_G \int dV n_g e^{i(\vec{G} - \Delta\vec{k})\vec{r}}$ • Condición de difracción: $\Delta\vec{k} = \vec{G}$, si elástica $\Rightarrow 2\vec{k}\vec{G} = G^2$ • $d_{hkl} = 2\pi/|\vec{G}|$. Si $\Delta\vec{k} = \vec{G} \Rightarrow F_G = N \int_c dV n(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} = N S_G$, con $S_G \equiv$ Factor de Estructura • $n(\vec{r}) = \sum_{j=1}^s n_j(\vec{r} - \vec{r}_j) = \sum_{j=1}^s n_j(\vec{\rho}) \Rightarrow S_G = \sum_j \int dV n_j(\vec{r} - \vec{r}_j) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}) = \sum_j \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j) \int dV n_j(\vec{\rho}) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{\rho})$ • Factor atómico de forma: $f_j = \int dV n_j(\vec{\rho}) \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{\rho}) \Rightarrow S_G = \sum_j f_j \exp(-i\vec{G} \cdot \vec{r}_j)$ y también $S_G = \sum_j f_j \exp\{-i(hn_1 + kn_2 + ln_3)\}$ • Anillos de difracción: $d_{hkl} = \lambda/2 \Rightarrow \sin \theta_{max} = \pi/2$, aparecen anillos para $d_{hkl} \geq \lambda/2$ • Factor atómico de forma, distribución esférica de carga: $f_j = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 n_j(r) \frac{\sin Gr}{Gr}$ • $\int_0^\infty dx x^n e^{-ax} = \frac{\Gamma(n+1)}{a^{n+1}}$ • $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) = n!$ • BCC: $S_{G,BCC} = f_{BCC} (1 + (-1)^{h+k+l})$ • FCC: $S_{G,FCC} = f_{FCC} (1 + (-1)^{h+k+l} + (-1)^{k+l} + (-1)^{h+l})$ • Intensidad de difracción: $I = S_G \cdot S_G^*$

TEMA 3. ENLACE CRISTALINO.

$U_T = U_{atrac} + U_{repuls}$ • **Potenciales repulsivos:** i) Potencial de Lenard-Jones: $U_R = B/R^{12}$ • ii) Potencial de Born-Mayer: $U'_R = \lambda \exp(-R/\rho)$ • **Cristales inertes (Van der Waals):** Potencial de interacción de una pareja de átomos: $U_{ij} = B/R_{ij}^{12} - A/R_{ij}^6 = 4\epsilon [(\sigma/R_{ij})^{12} - (\sigma/R_{ij})^6]$, con $\sigma = (B/A)^{1/6} \equiv$ parámetro de distancia; $\epsilon = A^2/4B \equiv$ parámetro de energía • Energía total: $U_T = 2N\epsilon \left[\sum_{j \neq i} (\sigma/R_{ij})^{12} - \sum_{j \neq i} (\sigma/R_{ij})^6 \right] \rightarrow R_{ij} = \rho_{ij}R$. $R \equiv$ distancia entre vecinos más próximos • $U_T(R) = 2N\epsilon [A_{12}(\sigma/R)^{12} - A_6(\sigma/R)^6] \equiv$ Energía total de interacción o Energía de Cohesión. • FCC: $A_{12} = 12.13188$, $A_6 = 14.45392$. HCP: $A_{12} = 12.13229$, $A_6 = 14.4589$ • Parámetro de red: $\left. \frac{dU_T(R)}{dR} \right|_{R=R_0} = 0 \Rightarrow R_0 = 2 \left(\frac{A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \sigma$ • **Cristales iónicos:** Interacción electrostática: $U_{elec} = \sum_{j \neq i} \frac{\pm Q^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ij}}$ (SI), $U_{elec} = \sum_{j \neq i} \frac{\pm Q^2}{R_{ij}}$ (CGS) • Energía total: $U_{Total}(R) = N \left[-\frac{Q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \sum_{j \neq i} \frac{\pm 1}{P_{ij}} + z\lambda e^{-R/\rho} \right]$ con $\alpha = \sum_{i \neq j} \frac{\pm 1}{P_{ij}} \equiv$ Constante de Madelung, $tb \frac{\alpha}{R} = \sum_j \frac{1}{r_{ij}} \Rightarrow U_{TOT}(R) = -\frac{NQ^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 R} + zN\lambda e^{-R/\rho}$ • Energía de Cohesión: $U(R_0) = -\frac{NQ^2\alpha}{4\pi\epsilon_0 R_0} [1 - \rho/R_0]$ • $Na + PI \rightarrow Na^+ + e^-$ • $e^- + Cl \rightarrow Cl^- + AE$ • $Na + Cl \rightarrow NaCl + E_{cohesión}$ • Cristal iónico lineal: $U_{Tot} = N \left[\frac{A}{RN} - \frac{\alpha Q^2}{R} \right]$ • **Cristales covalentes:** Singlete-Enlazante. Triplete-Antienlazante. • **Cristales Metálicos.**

Ecuación de movimiento: $m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \sum_p C_p (u_{n+p} - u_n)$, soluciones: Modos normales: $u_n(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)}$ • Relación de dispersión: $\omega^2 = \sum_p 2C_p \frac{1}{m} [1 - \cos kpa]$ • Interacción a primeros vecinos, $p = 1$ • $x = sa$ con $s = 0, 1, \dots$ • $u_{n+1} = u_n(x + a)$ • $m \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \Rightarrow \omega = \sqrt{\frac{4C_1}{m}} |\sin \frac{ka}{2}|$ • $\omega_{max} = \omega(k = \pm\pi/a) = \sqrt{4C_1/m}$ • 1ª Zona de Brillouin: $-\pi \leq ka \leq \pi$ • Condición de Bragg: $k_{max} = \pm k/a$ • Velocidad de grupo: $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ (1D), $v_g = \nabla_{\vec{k}} \omega(\vec{k})$ (3D). $v_g = \sqrt{\frac{C_1 a^2}{m}} |\cos \frac{ka}{2}|$ • Aproximación de onda larga: $ka \ll 1 \Rightarrow \sin \frac{ka}{2} \simeq \frac{ka}{2}$. Así pues, $\omega^2 = \frac{C_1}{m} k^2 a^2$ • **Dos átomos por celda primitiva:** Ecuaciones de movimiento: $m_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} = C(v_s + v_{s-1} - 2u_s)$, $m_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} + u_s - 2v_s)$. Soluciones (modos normales): $u_s = u_0 e^{isk_a} e^{-i\omega t}$, $v_s = v_0 e^{isk_a} e^{-i\omega t}$ • Relación de dispersión: $\omega_{\pm}^2 = C \left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \right) \pm C \sqrt{\left(\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2} \right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2} \sin^2 \frac{ka}{2}}$. ω_+ \rightarrow Rama óptica, $\omega_- \rightarrow$ Rama acústica. • Aproximación de onda larga ($ka \ll 1$): $\omega_+^2 \simeq 2C \frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}$. $\omega_-^2 \simeq \frac{C}{2(m_1 + m_2)} k^2 a^2$ • $k_{max} = \pm \frac{\pi}{a} \Rightarrow \omega_+^2 = 2C/m_1$. $\omega_-^2 = 2C/m_2$ • **Fonones:** $E = (n + 1/2)\hbar\omega$ • $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ • Scattering de un fonón: $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{k}_{fonón} + \vec{G}$ • Energía total de los fonones: $U = \sum_k \sum_p \langle n_{k,p} \rangle \hbar\omega_{k,p}$ • Número medio de fonones: $\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$ • $U = \sum_p \int d\omega D_p(\omega) \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$ • $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$ • **Densidad de estados:** (1D) Un estado permitido por cada intervalo $(\frac{2\pi}{L_x})$ • $D(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{dk}{d\omega} = \frac{dN}{d\omega}$ • (2D) 1 estado por área $(\frac{2\pi}{L_x}) (\frac{2\pi}{L_y})$ • $D(\omega) = \frac{L^2}{2\pi} k \frac{dk}{d\omega}$ • (3D) 1 estado por volumen $(\frac{2\pi}{L_x}) (\frac{2\pi}{L_y}) (\frac{2\pi}{L_z})$ • $D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} k^2 \frac{dk}{d\omega}$ • **Modelo de Debye:** Dispersión lineal $\omega = vk \Rightarrow D(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2 v^3}$ • $N = \int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega \Rightarrow$ Frecuencia de Debye (frecuencia máx.): $\omega_D^3 = \frac{6\pi^2 v^3}{V} N$ • $k_D = \omega_D/v$ • Energía térmica (1 polarización): $U_p = \int d\omega D(\omega) f(\omega) E_\omega$ • $U = U_p \times 3 \Rightarrow U = 9Nk_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} dx x \frac{e^{-x}}{e^x - 1}$ con $x = \beta\hbar\omega$, $\theta_D = x_D T = \frac{\hbar}{k_B} v \left(\frac{6\pi^2}{V} \right)^{1/3}$ • $C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{x_D} dx x \frac{e^{-x}}{(e^x - 1)^2}$ • **Ley T³ de Debye:** i) Altas temperaturas: $k_B T \gg \hbar\omega \Rightarrow x \ll 1$ • $U = 3Nk_B T$, $C_V = 3Nk_B$ • ii) Bajas temperaturas: $k_B T \ll \hbar\omega \Rightarrow x \gg 1$ • $U = 9Nk_B T^4 \frac{\pi^4}{15\theta_D^3}$ • $C_V = \frac{12\pi^4}{5} \frac{Nk_B}{\theta_D^3} T^3$ • **Modelo de Einstein:** $U = 3N \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$ • $C_V = \frac{3Nk_B (\hbar\omega/k_B T)^2}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} e^{\hbar\omega/k_B T}$ • i) Altas temperaturas: $C_V \simeq 3Nk_B$ • ii) Bajas temp.: $C_V \simeq 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$ • $\theta_E = \frac{\hbar\omega_E}{k_B}$ • **Expansión térmica:** $\langle x \rangle = \frac{3g}{4\epsilon^2} k_B T$, con $U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4$ • **Conductividad térmica:** $K = \frac{1}{3} Cvl$ con $C = C_V/V$, $v =$ velocidad media, y $l =$ recorrido libre medio.

TEMA 5. GAS DE ELECTRONES LIBRES DE FERMI.

Niveles de energía (1D): $\psi_n = A \sin \frac{2\pi n}{L}$ • $\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L} \right)^2$ • Energía de Fermi: $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N\pi}{2L} \right)^2$, con $2n_F = N$ • **Distribución de Fermi-Dirac:** $f(E) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/k_B T} + 1}$. A $T = 0K \Rightarrow \mu = \epsilon_F$ • **Gas de Electrones libres (3D):** $\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}}$, con $k_x = 0, \pm 2\pi/L, \pm 4\pi/L \dots$ • $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ • $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ • $k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$ • Energía de Fermi: $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$ • Velocidad de Fermi: $v_F = \frac{\hbar}{m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}$ • Densidad de estados: $N(\epsilon) = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \right)^{3/2}$ • $D(\epsilon) = \frac{dN}{d\epsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2} = \frac{3N}{2\epsilon}$ • Capacidad calorífica de un gas de electrones: $C_{e^-} = \frac{d}{dT} \langle U \rangle = \frac{d}{dT} \int_0^\infty d\epsilon \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) \Rightarrow C_{e^-} \simeq \frac{1}{3} \pi^2 \frac{3N}{2\epsilon_F} k_B^2 T \Rightarrow$ Capacidad calorífica experimental: $C = \gamma T$ (e⁻ libres) + αT^3 (Debye) • **Ley de Ohm:** $\vec{F} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$ • Desplazamiento de la esfera de Fermi: $\delta\vec{k} = \frac{-e\vec{E}t}{\hbar}$ • Densidad de corriente: $\vec{j} = nq\vec{v} = \sigma\vec{E}$ • Conductividad eléctrica: $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$, con $\tau \equiv$ tiempo medio entre choques. • Resistividad eléctrica: $\rho = 1/\sigma$ • Recorrido libre medio: $l = v_F \tau$ • Resistividad experimental: $\rho = \rho_{fonón} + \rho_{defectos}$

Movimiento en un CEM: Ecuación de movimiento:

$\hbar \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \delta \vec{k} = \vec{F}$ tb: $m \left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau} \right) \vec{v} = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$. Soluciones:

$v_x = -\frac{e\tau}{m} E_x - \omega_c \tau v_y$, $v_y = -\frac{e\tau}{m} E_y - \omega_c \tau v_x$, $v_z = \frac{-e\tau}{m} E_z$ •

Frecuencia de ciclotrón: $\omega_c = \frac{eB}{mc}$ • **Efecto Hall:** Campo Hall:

$E_y = -\omega_c \tau E_x = -\frac{eB\tau}{m} E_x$ • Coeficiente Hall: $R_H = \frac{E_y}{j_x B} = -\frac{1}{ne}$ •

Resistencia Hall: $\rho_H = -\frac{B}{ne} = \frac{E_y}{j_x}$ • **Conductividad térmica en**

metales: $K = \frac{\pi^2 nk_B T \tau}{3m}$ • Número de Lorenz: $\frac{k}{\sigma} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T$,

$L = \frac{k}{\sigma T} = 2.44 \times 10^{-8} \frac{J^2}{K^2 \cdot C^2}$

TEMA 6. BANDAS DE ENERGÍA.

Potencial periódico. Modelo de e^- cuasilibres. Gap en

$k = \pm \pi/a = \pm \frac{1}{2} G$ • Ondas en 1ª zona de Brillouin: $\psi_+ = 2 \cos \frac{\pi x}{a}$,

$\psi_- = 2i \sin \frac{\pi x}{a}$ • Magnitud del gap de Energía: $U(x) = U \cos \frac{2\pi x}{a}$ •

$E_g = \int_0^1 dx U(x) \{ |\psi_+|^2 - |\psi_-|^2 \} = U$ • **Funciones de Bloch.**

$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$ con $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})$ • **Modelo de**

Kronig-Penney. Potencial periódico (PP): función escalón.

Condiciones de contorno periódicas. Aprox: funciones δ • **Ecuación**

de ondas del e^- en un PP. Ec. de Schrödinger:

$\left[\frac{p^2}{2m} + U(x) \right] \psi(x) = \epsilon \psi(x)$ • $U(x) = \sum_G U_G e^{iGx}$ •

$\psi(x) = \sum_k C(k) e^{ikx}$ con $k = \frac{2\pi n}{L}$, L longitud del cristal. • Ecuación

de ondas (Fourier) (Ecuación central):

$(\lambda_k - \epsilon)C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0$ con $\lambda_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ •

$\psi_k(x) = \sum_G C(k - G) e^{i(k-G)x}$ • $u_k(x) \equiv \sum_G C(k - G) e^{-iGx}$

Invariante bajo traslaciones de cristal T • $\vec{k} \equiv$ Momento cristalino del

e^- : $\vec{k} + \vec{q} = \vec{k}' + \vec{G}$ • Energía del e^- libre:

$\epsilon(k_x, k_y, k_z) = (\hbar^2 / 2m)(\vec{k} + \vec{G})^2$ • Solución aprox. en la frontera:

$k = \pm \frac{1}{2} G \Rightarrow \epsilon = \lambda \pm U = \frac{\hbar^2}{2m} (\frac{1}{2} G)^2 \pm U \Rightarrow$

$\epsilon = \frac{1}{2} (\lambda_{k-G} + \lambda_k) \pm \left[\frac{1}{4} (\lambda_{k-G} - \lambda_k)^2 + U^2 \right]^{1/2}$ • **Nº de orbitales en**

una banda. $2N$ con $N = n^\circ$ de celdas primitivas de parámetro a .

TEMA 7. CRISTALES SEMICONDUCTORES.

Gap. Transiciones directas: $E_g = \hbar\omega_g$ • Transiciones indirectas:

$E_g = \hbar\omega - \hbar\Omega$ • **Ecuaciones de movimiento.** Velocidad de grupo:

$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk}$ • $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k})$ • Fuerza externa aplicada sobre el e^- :

$\vec{F} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt}$ • Campo magnético: $\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{v} \times \vec{B}$ • huecos: $\vec{k}_h = -\vec{K}_e$ •

$\epsilon_h(\vec{k}_h) = -\epsilon_e(\vec{k}_e)$ • $\vec{v}_h = \vec{v}_e$ • $m_h = -m_e$ • $\hbar \frac{d\vec{k}_h}{dt} = e(\vec{E} + \vec{v}_h \times \vec{B})$ •

Masa efectiva: $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dk^2}$ • $\left(\frac{1}{m^*} \right)_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dk_\mu dk_\nu}$ • Frecuencia de

ciclotrón: $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$