

Välikoe I, 4.3.2013

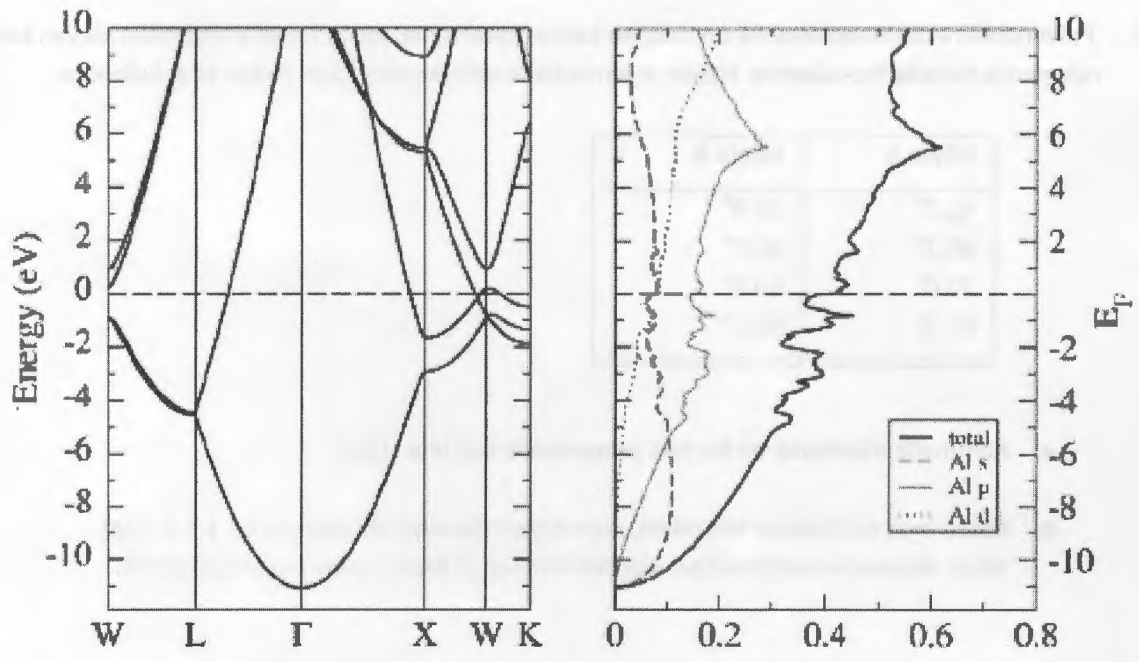
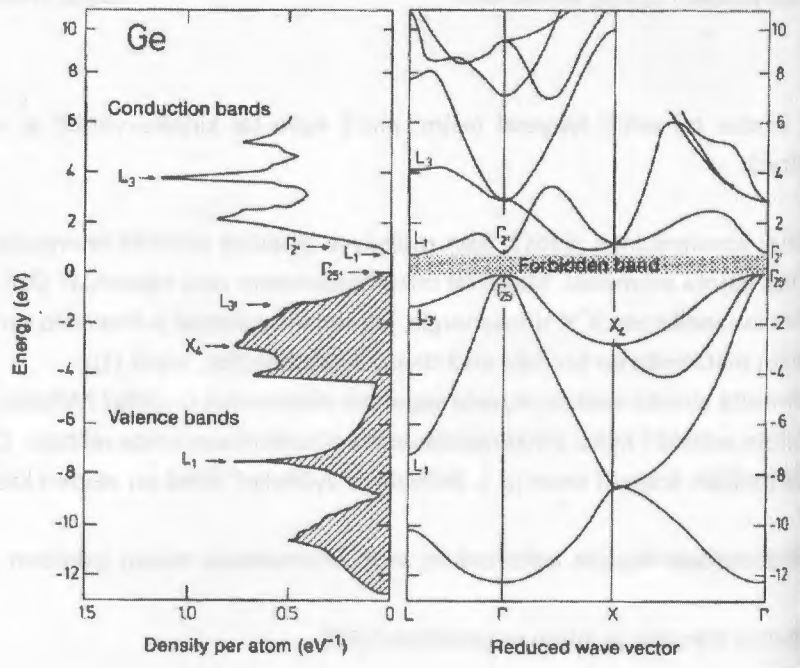
1. Määrittele, vastaa tai selitä **lyhyesti** (esim. piirrä kuva tai kirjoita yhtälö ja selitä siinä olevien suureiden merkitys):
 - a. Miten syntyy kovalenttinen sidos? Kun molekyyli lähestyy pienellä energialla katalyyttimetallin pintaa, se voi hajota atomeiksi. Miten tai miksi hajoaminen voisi tapahtua? (2p)
 - b. Miten lasketaan ionikiteen X^+Y^- sidosenergia, jos sen hilarakenne ja hilavakio tunnetaan? (1p)
 - c. Miksi joillakin metalleilla on bcc-hila eikä tiivispakkaushila (fcc, hcp)? (1p)
 - d. Millaisia kiinteitä aineita voidaan kuvata vapaiden elektronien mallilla? Millaisia suureita ja ilmiötä voidaan tällöin selittää? Miksi sähkönjohtavuutta ei kuitenkaan voida selittää. (2 p)
 - e. Miten määritellään Braggin tasot ja 1. Brillouinin vyöhyke? Mikä on näiden käsitteiden merkitys? (2p)
 - f. Miten muodostetaan Blochin aaltofunktio atomiorbitaaleista tiukan sidoksen approksimaatiossa (1p)
 - g. Mikä on Mottin transiio ja miten se tapahtuu? (1p)

2. Pulveridiffraktiomenetelmällä on tutkittu kahta materiaalia, joista toisella tiedetään olevan bcc-rakenne ja toisella fcc-rakenne. Neljän ensimmäisen diffraktiorenkkaan paikat ovat kulmissa:

Näyte A	Näyte B
42.2°	28.8°
49.2°	41.0°
72.0°	50.8°
87.3°	59.6°

- a. Kummalla näytteistä on fcc-hila ja kummalla bcc-hila. (4p)

 - b. Mitkä ovat näytteiden hilavakiot, kun röntgensäteilyn allonpituus on 1.5 Å (2p)
Vihje: Huomio ero diffraktiorenkaiden kulman ja Brackin sirontakulman välillä.
-
3. Kuvassa 1 on germaniumin (Ge) ja alumiinin (Al) vyörakenteet ja tilatiheydet. Tulkitse suureita vapaiden elektronien mallin, melkein vapaiden elektronien mallin sekä tiukan sidoksen approksimaatioiden näkökulmasta. Mitä kaikkea kuvista voi päätellä? Jos miehitettyjen tilojen aluetta, energia-aukkoa, tai Fermi-energiaa ei olisi merkitty kuvaan, miten voit päätellä, mitkä vyöt ovat miehitettyt? Ge:n elektronikonfiguraatio on $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$ (tai lyhyemmin $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2$) ja Al:n $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ (tai lyhyemmin $[Ne]3s^2 3p^1$). (4 p)



Kuva 1: Germaniumin ja alumiinin vyörakenteet ja niitä vastaavat tilatiheydet.