

## B. Osatentti (40% kurssin kokonaispisteistä)

**Tehtävä 1.** Kuvaile kvanttimekaanisin termein kovalenttisen sidoksen muodostumista. Mitkä ilmiöt alentavat kokonaisenergiaa, kun vapaat atomit lähestyvät toisiaan? Mitkä ilmiöt määrittävät sidospituuden? (3p)

**Tehtävä 2.** Kuvaile CsCl-kiteen rakennetta piirroksen avulla (vihje: koordinaatioluku on kahdeksan). Laske CsCl-kiteen yhden kopin muototekijä yksinkertaisen kuutiollisen kiteen Millerin indekseille (hkl). Jos oletetaan, että Cs- ja Cl-atomien muototekijät ovat yhtä suuret, mitkä ovat pulverinäytemittauksessa kolmen ensimmäisen intesiteettiä Millerin indeksit? (5p)

**Tehtävä 3.** Millaisia kiinteitä aineita voidaan kuvata vapaiden elektronien mallilla? Millaisia suureita ja ilmiötä voidaan tällöin selittää? Miksi sähkönjohtavuutta ei kuitenkaan voida selittää? (3p)

**Tehtävä 4.** Divalentti metalli muodostaa kaksidimensioisen suorakaidehilan, jonka hilavakiot ovat  $a$  ja  $b = 4a/3$ . Piirrä käänteishila ja 1. Brillouinin vyöhyke. Laske vapaaelektronimallin Fermi-aaltovektorin pituus  $a:n$  avulla. Koskettaako Fermi-pinta kaikkia 1. Brillouinin vyöhykkeen reunoja (Braggin tasoja)? (5p)

**Tehtävä 5.** Piirrä alumiinin ( $Z = 13$ ;  $[\text{Ne}]3s23p1$ ) ja kuparin ( $Z = 29$ ;  $[\text{Ar}]3d104s1$ ) karkeat vyö rakenteet ja tilatiheydet. Merkitse kuviisi miehityt elektronitilat sekä Fermi-energiat. Kun piirrät karkeita/luonnosteltuja kuvia, kiinnitä erityistä huomiota siihen, mitkä yksityiskohdat ovat mielestäsi oleellisia! (4p)

### Tehtävä 6.

Vieressä on kahden kiteisen materiaalin fononien dispersiorelaatiot  $[100]$ -suunnassa. Kummankin materiaalin rakenne on kuutiollinen ja  $[100]$ -suunnassa värähtelevien tasojen välinen etäisyys on noin  $2 \text{ \AA}$ .

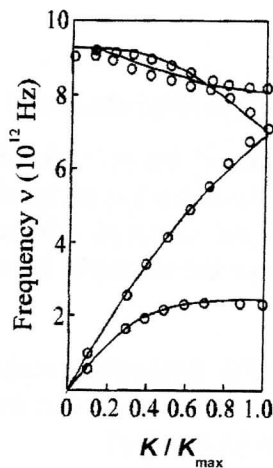
a) Mitä voit sanoa materiaalien rakenteesta dispersiorelaatioiden perusteella? (2p)

b) Tulkitse dispersiorelaatioiden kuvaajista osat  $v < 7 \text{ THz}$  ja  $v > 7 \text{ THz}$ . Minkä tyyppistä kiteen ionien värähtelyä ne vastaavat? Mitä voit sanoa ionien värähtelyn polarisaatioista? (4p)

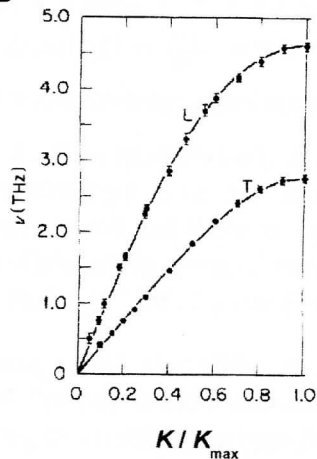
c) Arvioi materiaalien äänennopeus tässä kidesuunnassa. (2p)

d) Piirrä (karkeasti) tämän kidesuunnan värähtelyjen kontribuutio kummankin materiaalin fononiseen tilatiheyteen  $g(\omega)$ . (2p)

**A**



**B**



**Tehtävä 7.** Suoritamme hilavärähtelyjä karakterisoivan neutronisirontamittauksen kiteiselle materiaalille, jolla on FCC-kiderakenne. Tarkastellaan tietyssä kidesuunnassa tapahtuvan värähtelyn tuottamaa sirontadataa valitulla sirontavektorin  $\vec{q}$  arvolla. Hahmottele sironneen neutronisäteen intensiteetti energian funktiona ja selitä siinä näkyvien piirteiden fysikaalinen alkuperä. (6 p)

**Tehtävä 8.** Timantti on huoneenlämmössä eräs parhaista lämmönjohteista. Äänennopeus timantissa on noin  $12\,000 \text{ m/s}$  ja timantin Debye-lämpötila on (lähteestä riippuen)  $\Theta_D = 1860 - 2230 \text{ K}$ . Selitä näiden ominaisuuksien perusteella timantin erittäin korkea lämmönjohtavuus. (4 p)