

---

---

**PHYS-C0240 Materiaalifysiikka (osatentti ja kokotentti) / Tfy-0.3233 Materiaalifysiikka I tentti 25.5.2016**

Merkitse selvästi tenttipaperisi ensimmäiselle sivulle, haluatko suorittaa kurssin pelkästään tämän tentin perusteella (100% arvosanasta) vai osatenttinä (40% arvosanasta). Jälkimmäisessä tapauksessa kevään 2016 kurssin harjoitus- ja kotitehtävät pisteet lasketaan yhteen tenttipisteiden kanssa arvosanan määrittämiseksi kevään kurssin pisterajojen mukaisesti.

Ylioppilaskirjoituksissa hyväksyty laskin on sallittu, taulukkokirjat eivät ole sallittuja.

**Perustele kaikki vastauksesi selkeästi!**

---

---

**Tehtävä 1. (16 p)**

- a. Ionikiteen potentiaalille voidaan käyttää mallia

$$u(r) = -\frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{C}{r^m}.$$

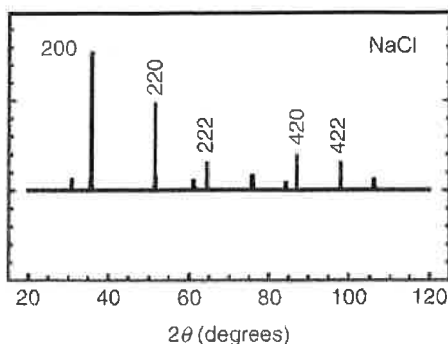
Mikä on mallin fysikaalinen perusta? Mitä eri termit tarkoittavat? (2 p)

- b. Miten van der Waals -sidos syntyy? Miten se käyttäytyy etäisyyden funktiona? (2p)
- c. Metallien yleisiä rakenteita ovat fcc ja bcc. Selitä, miksi näitä erilaisia rakenteita esiintyy? (2p)
- d. Selitä lyhyesti mikä on parijakaumafunktio (pair distribution function) ja mitä sen avulla voidaan päätellä materiaalin atomiskaalan rakenteesta. (2p)
- e. Luonnosteletyypillinen kiteisen aineen lämmönjohtavuus  $\kappa_{th}$  lämpötilan funktiona. Merkitse käyrään lämmönjohtavuuden skaalaus lämpötilan mukaan,  $\kappa_{th} \propto T^\alpha$ , hyvin matalissa ja korkeissa lämpötiloissa. Lopuksi selitä lyhyesti näiden kahden eri skaalautuvuuseksponentin fysikaalinen alkuperä. (4p)
- f. Millaisia kiinteitä aineita voidaan kuvata vapaiden elektronien mallilla? Mitä suureita ja ilmiötä voidaan tällöin selittää? (2p)
- g. Tarkastellaan elektronitiloja yksidimensioisessa atomiketjussa, jossa x-akselilla olevien atomien välimatka (hilavakio) on  $a$ . Aaltofunktio on vetyatomin  $1s$ -tilan kaltainen jokaisen ytimen ympärillä. Hahmottele Blochin teoreeman perusteella elektronin Blochin aaltofunktion pääpiirteet x-akselilla, kun vyöindeksi  $n=1$  ja tilan aaltovektori  $K_x = 0$  tai  $\pi/a$ . Perustele hahmotteluasi kaavojen avulla. (2p)

**Tehtävä 2. (6p)**

Debyen malli kiinteän materiaalin ominaislämmölle.

- a) Luonnosteletyyleinen kuvaaja kiinteän materiaalin ominaislämmölle lämpötilan funktiona. (1p)
- b) Selitä lyhyesti Debyen mallin oletukset ja perustelut niille. (2p)
- c) Debyen malli sisältää yhden materiaalispesifin parametrin. Mikä tämä on ja miten se voidaan määrittää eri materiaaleille? (1p)
- d) Selitä Debyen mallin toimivuus materiaalin ominaislämmön kuvaamisessa lämpötilan funktiona. Millä lämpötila-alueilla malli toimii erityisen hyvin, millä taas ei? Mistä tämä johtuu? (2p)



Kuva 1: NaCl pulverinäytemittauksen diffraktiospektri.

### Tehtävä 3. (6p)

- Kuvaile NaCl-kiteen rakennetta piirroksen avulla (vihje: koordinaatioluku on kuusi). (1p)
- Kuvataan NaCl-kidehilaa yksinkertaisena kuutiollisena (SC) hilana. Kuinka monta atomia on tällöin kannassa, ja mitkä ovat niiden paikkavektorit SC-hilan alkeisvektoreiden avulla lausuttuna? (Aseta Cl-atomi origoon) (2p)
- Laske edellisessä kohdassa määrittämäsi kannan muototekijä yksinkertaisen kuutiollisen kiteen Millerin indekseille (hkl). Oleta, että Na-atomin muototekijä on häviävän pieni, eikä sitä tarvitse ottaa huomioon kannan muototekijää laskettaessa. (2p)
- Selitä tuloksesi avulla Kuvan 1 pulverinäytemittauksen diffraktiospektriä. Onko Na-atomin muototekijän häviäminen hyvä approksimaatio? (1p)

### Tehtävä 4.(4p)

Piirrä alumiinin ( $Z = 13$ ;  $[\text{Ne}]3s^23p^1$ ) ja kuparin ( $Z = 29$ ;  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$ ) karkeat vyörakenteet ja tilatiheydet. Merkitse kuviisi miehityt elektronitilat sekä Fermi-energioiden paikat. Kun piirrät karkeita/luonnosteltuja kuvia, kiinnitä erityistä huomiota siihen, mitkä yksityiskohdat ovat mielestäsi oleellisia! (4p)

### Tehtävä 5. (8p)

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

- Mitä voit sanoa materiaalien rakenteesta dispersiorelaatioiden perusteella? (2p)
- 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? (2p)
- Arvioi materiaalien äänennopeus tässä kidesuunnassa. (2p)
- Piirrä (karkeasti) tämän kidesuunnan värähtelyjen kontribuutio kummankin materiaalin fononiseen tilatiheyteen  $g(\omega)$ . (2p)

