
PHYS-C0240 Materiaalfysiikka, tentti 24.10.2018

Ylioppilaskirjoituksissa hyväksytty laskin on sallittu, taulukkokirjat eivät ole sallittuja.

Perustele kaikki vastauksesi hyvin. Käytä kuvia ja kaavoja, jos mahdollista, ja selitä ratkaisusi selkeästi.

Arvosana määräytyy tentin perusteella kahdella vaihtoehtoisella tavalla: 1) pelkästään tenttiin perustuen (tentin osuus siis 100% arvosanasta) tai 2) ottamalla huomioon myös luentojen esitehtävät ja laskuharjoitukset (tentin osuus 40%). Näistä kahdesta vaihtoehdosta parempi tulos kirjataan lopulliseksi arvosanaksesi.

Tehtävä 1.

Kiinteiden materiaalien ominaislämpöjen mallit (10p).

- Selitä lyhyesti Einsteinin ja Debyen ominaislämpömallien perusoletukset ja niiden perustelut. (3p)
- Mikä on Debyen malliin liittyvän parametrin Debyen lämpötilan T_D fysikaalinen merkitys? (2p)
- Osoita yksinkertaisilla laskuilla miten sekä Einsteinin että Debyen mallit antavat kyllin korkeilla lämpötiloilla Boltzmannin klassista mallia sekä empiiristä Dulongin ja Petit'n sääntöä vastaavan tuloksen kiinteiden materiaalien ominaislämmöille. (Mitä *kyllin korkea lämpötila* tarkoittaa tässä?) (2p)
- Miten Debyen ja Einsteinin mallien tulokset eroavat hyvin matalilla lämpötiloilla ja miksi? Toisin sanoen, selitä kvalitatiivisesti kummankin mallin ominaislämmön T -riippuvuus, kun $T \rightarrow 0$. Miten mallien ennusteet vertautuvat mittaustuloksiin? (3p)

Tehtävä 2.

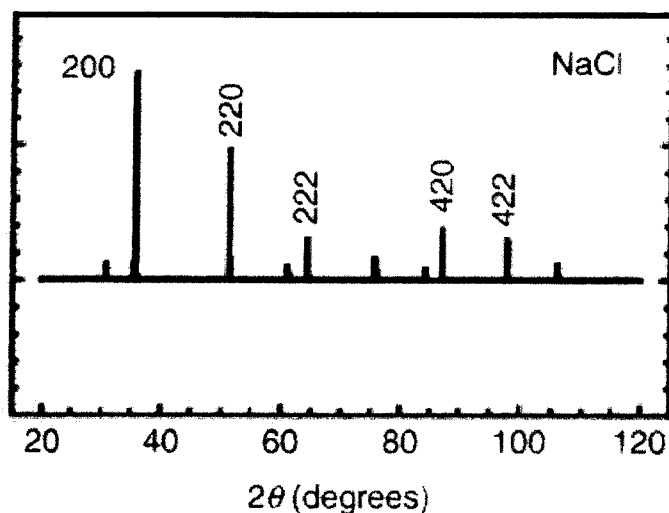
Elektronirakenteet (14p). Tarkastellaan elektronitiloja samanlaisten atomien muodostamassa yksidimensioisessa kidehilassa, jossa atomien välimatka on a .

- Miten muodostetaan elektronin aaltofunktio tiukan sidoksen approksimaatiossa? (2p)
- Osoita, että kohdan a) aaltofunktio toteuttaa Blochin teoreeman. (2p)
- Oleta, että atomeihin liitetyt aaltofunktiot ovat vetyatomin elektronin 1s-aaltofunktion kaltaisia. Hahmottele elektronin aaltofunktio ketjussa, kun elektronin aaltovektori on 1. Brillouin'n vyöhykkeen reunalla. (1p)
- Miten elektronin energia riippuu elektronin aaltovektorista tiukan sidoksen approksimaatiossa? (Anna kaava ja hahmottele kuva sen perusteella.) Mitkä approksimaation parametrit kuvaavat tätä riippuvuutta? Mistä näiden parametrien arvot riippuvat? (3p)
- Kuvataan seuraavaksi elektronien tilaa ketjussa käyttämällä melkein vapaiden elektronien mallia. Hahmottele elektronin energian riippuvuus aaltovektorista piirtämällä kolme energiavyötä 1. Brillouin'n vyöhykkeen sisällä. Mitkä parametrit vaikuttavat riippuvuuteen? (2p)
- Hahmottele melkein vapaiden elektronien aaltofunktiot pitkin atomiketjua kahdessa alimmassa energiatilassa, kun elektronien aaltovektori on 1. Brillouin'n vyöhykkeen reunalla. Miten näitä aaltofunktioita vastaavat tilat syntyvät tiukan sidoksen approksimaatiossa? (2p)
- Miten tiukan sidoksen ja melkein vapaiden elektronien mallit selittävät, että kiteinen materiaali voi olla joko metalli, eriste tai puolijohde? (2p)

Tehtävä 3.

Kidehila, käänneishila ja sironta (6p + 3p)

- NaCl:n kiderakenne on kuutiollinen ja jokaisella ionilla on kuusi lähinaapuria. Kuvaile NaCl-kiteen rakennetta piirroksen avulla. (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 edellisissä kohdassa määrittämäsi kannan rakennekijä SC-hilan Millerin indekseille (hkl). (2p)
- Mikä on sironnan valintasääntö, jos oletetaan, että Na-atomin muototekijä $f_{Na} = 0$. Miten valintasääntö muuttuu, jos muototekijät ovat yhtäsuuret, $f_{Na} = f_{Cl}$? (1p)
- TÄMÄ KOHTA ANTAA YLIMÄÄRÄISIÄ PISTEITÄ!** Kuvassa 1 on esitetty NaCl:n pulverinäytteen röntgendiffraktiopiikit ja esitetty intensiivisempien piikkien tulkinta. Kumpaa kohdassa d) esitettyä aproksimaatiota ($f_{Na} = 0$ vai $f_{Na} = f_{Cl}$) kuvan data tukee? Mitkä ovat kulman 76° piikin Millerin indeksit? Perustele Braggin kuvan ja kohdan a) avulla, mitkä voisivat olla kulman 31° piikin Millerin indeksit ja miksi piikin intensiteetti on pieni. Perustele kaikki vastauksesi! Piikkien indeksien suhteiden määrittäminen kuvasta luettavista kulmista on mahdollista mutta ei välttämätöntä. (3p)

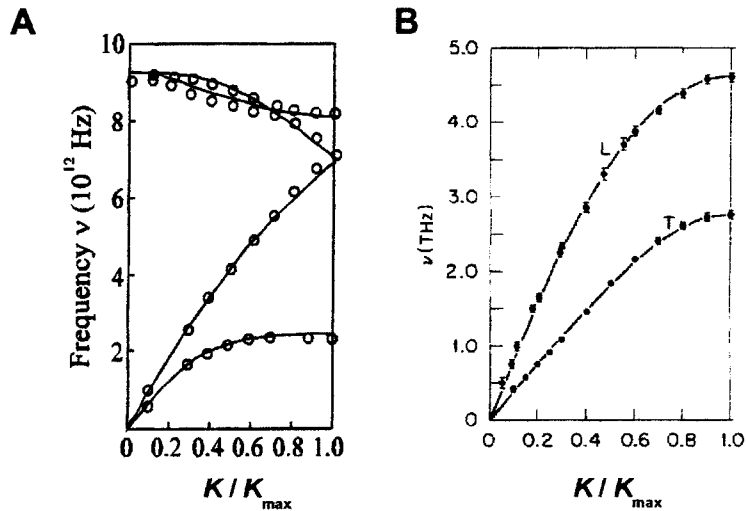


Kuva 1: NaCl pulverinäyttemittauksen diffraktiospektri.

Tehtävä 4.

Hilavärähtelyt kiinteissä materiaaleissa. (10 p)

- Selitä lyhyesti ja ytimekkäästi kiinteiden materiaalien hilavärähtelyihin liittyvä käsite *fononi*. (2p)
- Hahmottele tyypillinen diatomisen 1D-ketjun hilavärähtelyjen dispersiorelaatio ja selitä lyhyesti sen eri osa-alueet. Oletus: oppikirjan käsittelyn mukaisesti ketjun atomityypeillä on eri massat ja ketjussa peräkkäiset atomien väliset kytkentävakiot vuorottelevat suuruudeltaan, $-\kappa_1 - \kappa_2 - \kappa_1 - \kappa_2 - \dots$ jne. (3p)
- Kuvaile yksiatomisen 1D-ketjun atomien värähtelyä, kun etenevän värähtelyn aaltoluku on hyvin pieni ($k \rightarrow 0$) ja toisaalta kun aaltovektori on ensimmäisen Brillouinin vyöhykkeen reunalla. (2p)
- Kuvassa 2 alla on kahden kiteisen kuutiollisen materiaalin fononien dispersiorelaatiot [100]-suunnassa. Mitä voit sanoa materiaalien rakenteesta ja atomien värähtelyjen polarisaatioista dispersiorelaatioiden perusteella? (3p)



Kuva 2: Kahden kuutiollisen materiaalin fononiset dispersiorelaatiot [100]-suunnassa.

