PHYS-C0240 Materiaalifysiikka, tentti 21.10.2019 [5 tehtävää, 3 sivua, max 40 pistettä].

Ylioppilaskirjoituksissa hyväksytty laskin on sallittu, taulukkokirjat eivät ole sallittuja.

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

Merkitse ensimmäiseen vastauspaperiisi haluatko kurssin arvostelun pelkästään tähän tenttiin perustuen (*kokotentti*) vai haluatko ottaa lisäksi huomioon syksyn 2019 pohdintatehtävät ja laskuharjoitukset (*osatentti*).

Tehtävä 1.

Kiinteiden materiaalien ominaislämmön mallit (10p).

a) Selitä lyhyesti Einsteinin sekä Debyen ominaislämpömallien oletukset ja niiden perustelut. (2p)

b) Piirrä tyypillinen kiinteän materiaalin ominaislämpö lämpötilan funktiona (sopivalla C-akselin skaalauksella). Hahmottele samaan kuvaajaan klassisen ekvipartitioteoreeman mukainen ennuste (Boltzmannin malli) sekä Debyen ja Einsteinin mallien ennusteet ominaislämmölle. (3p)

c) Miten Einsteinin ja Debyen mallien ennustamat ominaislämmöt käyttäytyvät korkeilla ja toisaalta hyvin matalilla lämpötiloilla? Anna kummankin mallin tapauksessa selkeä fysikaalinen selitys ominaislämmön T-skaalautuvuuksille. (4p)

d) Anna jokin mahdollinen fysikaalinen syy sille miksi Debyen mallin antama ennuste tietyn kiinteän materiaalin ominaislämmölle voisi havaittavissa määrin poiketa mitatuista arvoista. (1p)

Tehtävä 2.

Hilavärähtelyt 1D-atomiketjussa (10p).

a) Selitä hilavärähtelyihin liittyvät käsitteet *fononi* ja *kideliikemäärä*. (2p)

b) Tarkastellaan 1D-atomiketjua, jossa kahden vierekkäisen atomin välinen tasapainoetäisyys on a. Oletetaan atomien väliset vuorovaikutukset ainoastaan lähinaapurien välisiksi ja harmonisiksi. Hahmottele samaan kuvaan ketjun hilavärähtelyn dispersiorelaatio (ω vs. k), kun 1) kaikki atomit ovat identtisiä (yksiatominen ketju); ja 2) vierekkäisten atomien massat ovat erisuuret (diatominen ketju). (2p)

c) Merkitse edelliskohdassa hahmottelemiisi dispersiorelaatioiden kuvaajiin kumpaakin atomiketjua vastaavat 1. Brillouinin vyöhykkeet. (2p)

d) Esittele ja selitä kummankin atomiketjun dispersiorelaation pääpiirteet. (4p)

Tehtävä 3.

Kidehila, käänteishila ja sironta (9p)

a) CsCl:n kiderakenne on kuutiollinen ja jokaisella ionilla on kahdeksan lähinaapuria. Kuvaile CsCl-kiteen rakennetta piirroksen avulla. (1p)

b) Kuvataan CsCl-kidehilaa yksinkertaisena kuutiollisena (SC) hilana. Kuinka monta atomia on tällöin kannassa, ja mitkä ovat niiden paikkavektorit SC-hilan alkeisvektoreiden avulla lausuttuna? (1p)

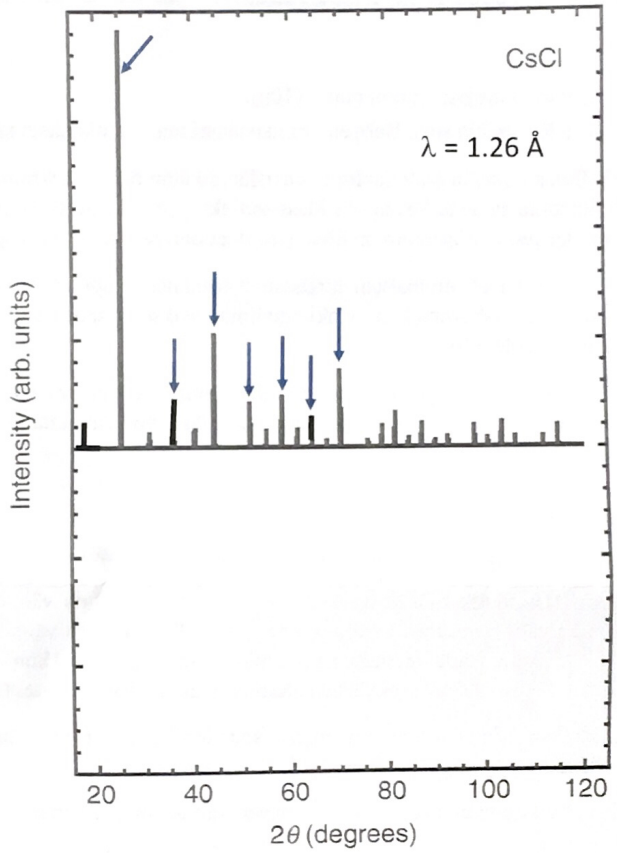
c) Laske edellissä kohdassa määrittämäsi kannan rakenntekijä SC-hilan Millerin indekseille (hkl). (1p)

d) Kuvassa 1 on esitetty CsCl:n pulverinäytteestä mitattu Röntgen-spektri. Mitkä ovat nuolilla merkittyjen intensiivisten piikkien Millerin indeksit? Päättelyä varten ei tarvitse määrittää sirontakulmien suhteellisia paikkoja, edellisessä kohdassa lasketusta rakennetekijästä saatu valintasääntö piikkien intensiteeteille riittää. (2p)

e) Mitä voit sanoa Cs- ja Cl-atomien muototekijöiden suuruudesta toistensa suhteen kuvan 1 ja kohdan d) tuloksen perusteella? (1p)

f) Kuvan 1 intensiivisin piikki on kulmassa $2\theta = 25.0^{o}$. Mikä on CsCl:n hilavakio? Käytetyn Röntgensäteilyn aallonpituus on 1.26 Å. (3p)

Perustele kaikki vastauksesi!



Kuva 1: CsCl pulverinäytemittauksen diffraktiospektri.

Tehtävä 4.

Blochin teoreema, tiukan sidoksen aproksimaatio ja melkein vapaiden elektronien malli (8p). Kuvataan elektronien tiloja samanlaisten atomien muodostamassa yksidimensioissa kidehilassa jossa atomien välimatka x-akselilla on a.

a) Hahmottele elektronin energian riippuvuus aaltovektrorista melkein vapaiden elektronien mallissa piirtämällä kaksi energiavyötä 1. Brillouin'n vyöhykkeen sisällä. Mitkä parametrit vaikuttavat riippuvuuteen? (2p)

b) Miten saadaan melkein vapaiden elektronien mallin aaltofunktiot 1. Brillouin'n vyöhykkeen reunalla kahden alimman energiavyön tapauksissa? Atomiytimet aiheuttavat attraktiivinen potentiaalin elektroneille hilapisteiden kohdalla. Hahmottele ko. aaltofunktiot x-akselilla! (2p)

c) Miten tiukan sidoksen approksimaatio antaa a) -kohdassa hahmotellut kaksi alinta energiavyötä? Mitkä ovat tarvittavat parametrit? (2p)

d) Hahmottele tiukan sidoksen aproksimaation aaltofunktiot 1. Brillouin'n vyöhykkeen reunalla ja keskellä ($k = 0$) kahden alimman energiavyön tapauksissa, kun atomit ovat vetyatomeita. Merkitse kuvien viereen tilojen vyöindeksit (n) ja aaltovektorit (k)! (2p)

Tehtävä 5.

Fermi-pinta ja melkein vapaiden elektronien malli (3p).

Tarkastellaan melkein vapaiden elektronien tiloja kaksidimensioisen neliöhilan tapauksessa. Hahmottele Fermi-pinta 1) monovalentin ja 2) divalentin metallin tapauksessa, kun periodinen potentiaali voimistuu häviävän heikosta hyvin voimakkaaseen. Kolme kuvaa riittää kummassakin tapauksessa. Merkitse eri tapauksissa onko aine metalli vai eriste.