

Palauta tehtäväpaperi! Sanallisten tehtävien vastauksissa saa ja pitää käyttää kaavoja apuna tarvittaessa. Laskutehtävien vastauksiin pitää sisältyä myös sanallista selitystä siitä, mitä ollaan tekemässä.

1. Ionikiteen potentiaalille voidaan käyttää mallia

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

- a) Mikä on mallin fysikaalinen perusta? Mitä eri termit tarkoittavat? (2 p.)
 b) Laske mallia käyttäen ionikiteen kokoonpuristuvuuskerroin (bulkmoduli, tilavuuskimmoisuus) (3 p.)
 c) Eliminoi C tasapainoetäisyyden r_0 avulla. (1 p.)
2. Piin (Si) kiderakenne on timanttihila. Sitä voidaan kuvata kannallisena yksinkertaisena kuutiollisena hilana (hilavakio $5,43 \text{ \AA}$).
 a) Laske rakennetekijä. (3 p.)
 b) Missä suunnissa havaitaan Si-pulverinäytteestä heijastuneen röntgensäteilyn kaksi ensimmäistä intensiteettimaksimia, kun röntgensäteilyn aallonpituus on $1,5 \text{ \AA}$? (3 p.)
3. Tarkastellaan yksidimensioista lineaarista hilaa (ketjua). Ketjussa on hyvin suuri määrä atomeita, joiden välimatka on $a/2$ ja tasapainoon palauttava jousivakio f . Joka toisen atomin massa on M_1 ja joka toisen M_2 .
 a) Kirjoita ketjun liikeyhtälöt. (1 p.)
 b) Ratkaise liikeyhtälöt ja laske ketjun dispersiorelaatio $\omega(q)$ käyttämällä yritettä $u_{n\alpha} = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} u_\alpha(q) e^{i(qna - \omega t)}$, missä $\alpha = 1, 2$. (5 p.)
4. a) Millainen on elektronien aaltofunktio tiukan sidoksen approksimaatiossa? Osoita, että se toteuttaa Blochin teoreeman. (3 p.)
 b) Tiukan sidoksen approksimaatiossa elektronien energiavyöt saadaan (yksinkertaisen kuutiollisen hilan tapauksessa) lausekkeesta:

$$E(\vec{k}) = E_i - A - 2B(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a).$$

Mitä parametrit E_i , A ja B tarkoittavat, eli miten ne on määritelty ja miten ne vaikuttavat vyörakenteeseen? (3 p.)

5. Johda metallin sähkönjohtavuudelle lauseke

$$\sigma = \frac{e^2}{8\pi^3 \hbar} \int_{\epsilon = \epsilon_F} \frac{v_x^2(\vec{k})}{v(\vec{k})} \tau(\vec{k}) dS_\epsilon$$

lähtien virrantiheydestä

$$\vec{j} = -\frac{e}{8\pi^3} \int_{1.BZ} v(\vec{k}) f(\vec{k}) d\vec{k}$$

ja linearisoidusta Boltzmannin kuljetusyhtälöstä

$$f(\vec{k}) \approx f_0(\vec{k}) + \frac{e}{\hbar} \tau(\vec{k}) \vec{E} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_0(\vec{k}),$$

kun sähkökenttä $\vec{E} = \vec{E}_x$. Mitä ovat $f(\vec{k})$ ja $\tau(\vec{k})$? (6 p.)