

Välikoe I, 7.3.2011

1. Määrittele, vastaa tai selitä **lyhyesti** (esim. piirrä kuva tai kirjoita yhtälö ja selitä siinä olevien suureiden merkitys):
- Van der Waals -sidokset
 - Madelungin vakio
 - Mitä yhtäläisyyksiä ja mitä eroja on sinkkivälke- (zinc blende) ja wurtsiittirakenteilla?
 - Lauen diffraktioehto
 - Rakennetekijä diffraktiossa
 - Millerin indeksit
 - Braggin tasot ja Brillouinin vyöhykkeet
 - Adiabaattinen approksimaatio (elektroneille hilassa)
 - Bloch'n aaltofunktio
 - Thomas-Fermi -varjostuspituus
 - Mottin transitio

Kukin ylläolevista kohdista on 1 pisteen arvoinen (yhteensä siis 11 p).

2. Kuvassa 1 on NaCl:sta ja KCl:sta mitattua pulveridiffraktiodataa (röntgensäteilyn aallonpituus $\lambda=1.54$ Å). Minkälainen rakenne näillä kiteillä on (piirrä kuva sopivaksi katsomastasi yksikkökopista)? Kyseisen rakenteen rakennetekijä S on seuraavanlainen (h, k, l ovat konventionaalisen kuutiollisen yksikkökopin Millerin indeksit ja f_i on atomin i sirontatekijä):

h, k, l kaikki parillisia	$S = 4 \times (f_{\text{Na/K}} + f_{\text{Cl}})$
h, k, l kaikki parittomia	$S = 4 \times (f_{\text{Na/K}} - f_{\text{Cl}})$
muulloin	$S = 0$

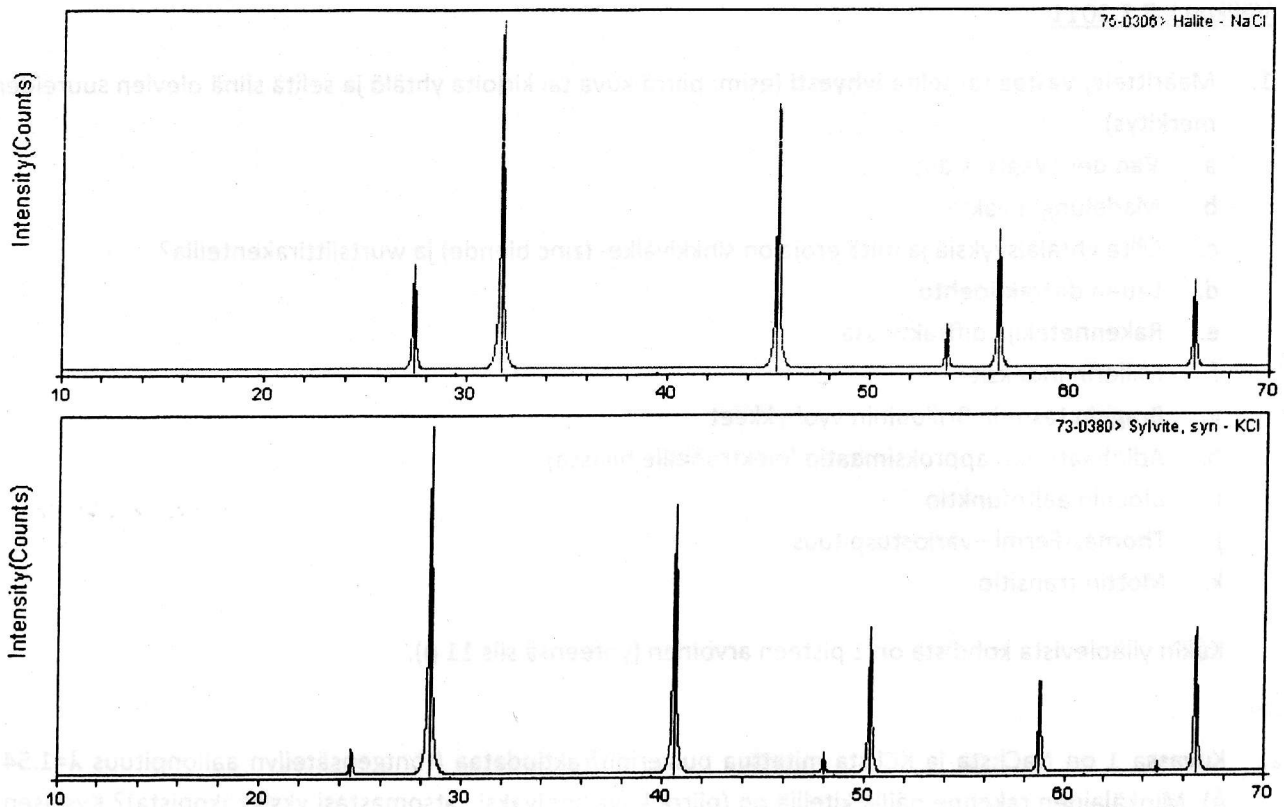
Tunnista diffraktiopiikkejä vastaavat hilatasot (hilavakio a on konventionaalisen kuutiollisen kopin särmän pituus) Braggin lain avulla:

$$\lambda = 2d \sin \theta, \text{ missä } d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

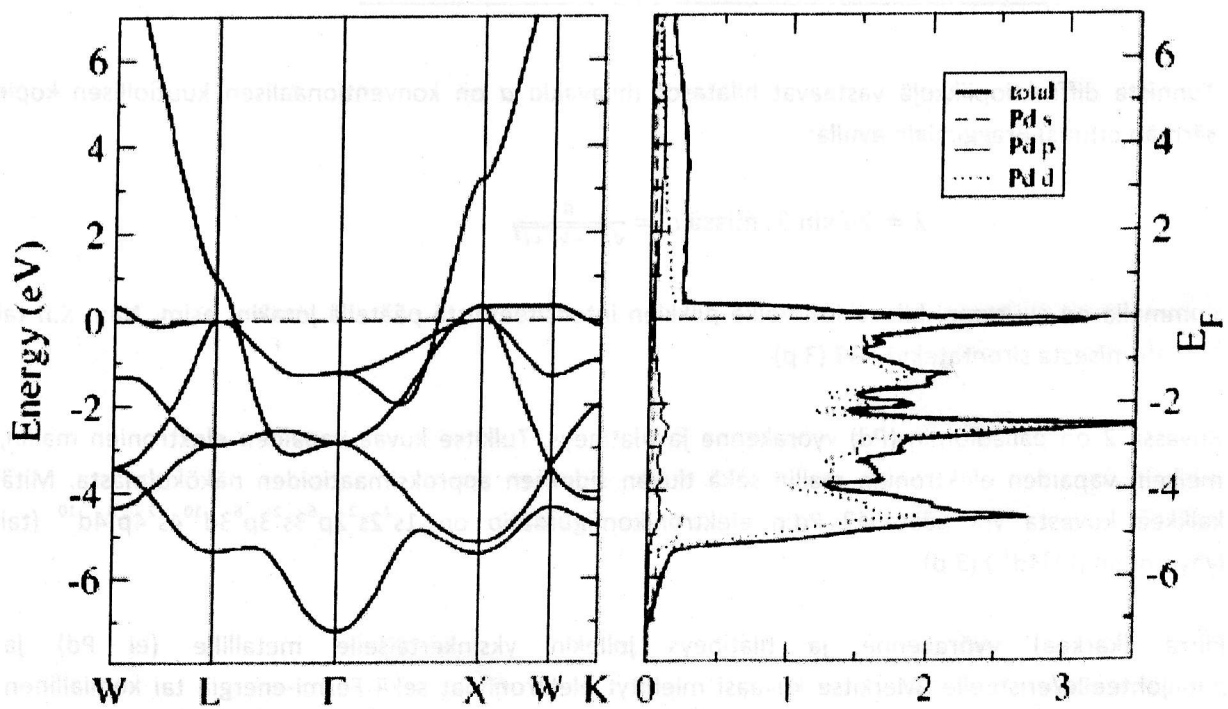
Kummalla on suurempi hilavakio? Voiko piikkien intensiteeteistä päätellä jotakin, esim. Na:n K:n tai Cl:n atomisesta sirontatekijästä? (3 p)

3. Kuvassa 2 on palladiumin (Pd) vyörakenne ja tilatiheys. Tulkitse kuvaa vapaiden elektronien mallin, melkein vapaiden elektronien mallin sekä tiukan sidoksen approksimaatioiden näkökulmasta. Mitä kaikkea kuvasta voi päätellä? Pd:n elektronikonfiguraatio on $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10}$ (tai lyhyemmin $[\text{Kr}]4d^{10}$) (3 p)
4. Piirrä (karkea) vyörakenne ja tilatiheys jollekin yksinkertaiselle metallille (ei Pd) ja puolijohteelle/eristeelle. Merkitse kuvaasi miehityt elektronitilat sekä Fermi-energia tai kemiallinen potentiaali, ja selitä miksi yksi on metalli ja toinen taas puolijohde/eriste. (3 p)

Huom. kun piirrät karkeita/luonnosteltuja kuvia, kiinnitä erityistä huomiota siihen, mitkä yksityiskohdat ovat mielestäsi oleellisia!



Kuva 1: Pulveridiffraktiodataa: NaCl ja KCl. Vaaka-akselin yksikkö on aste ja kulma on 2θ .



Kuva 2: Palladiumin vyö rakenne (vasemmalla) ja sitä vastaava tilatiheys (oikealla).