

VARIAATIOPERIAATTEESTA (LYHYESTI)

KUN TUNNEMME TARUUSTELLUN SYSTEMIN AALTOFUNKTIO,
SAAMME FYSIKAALISTEN OBSERVABELIEN ARVOT SOPIVALLA
OPERAATTORIN VALINNALLA.

MUTTA MITEN SAADA AALTOFUNKTIO?

OLETETAAN, ETTÄ MEILLÄ ON FUNKTIO ψ

$$\psi = \sum_i c_i |i\rangle, \text{ jossa } |i\rangle \text{ Ovat täydellinen } \hat{H}:n \text{ (HAMILTONIN OPERAATTORIN) OMINAISTILOJEN} \\ \text{JOUKKO, } \langle j|i\rangle = \delta_{ij}$$

$$\text{TÄLLÖIN } \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{ij} c_j^* c_i \langle j|i\rangle = \sum_i |c_i|^2 = 1.$$

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{ij} c_j^* c_i \langle j | \hat{H} | i \rangle = \sum_{ij} c_j^* c_i E_i \delta_{ij} = \sum_i |c_i|^2 E_i$$

JOSKA SIIS E_i ON TIILN $|i\rangle$ OMINAISENERGIA.

NYT SIIS VOISIMME LASKEA $|\psi\rangle$:N ENERGIAN ODOTUSARVON
KERTOIMIEN c_i JA OMINAISENERGIOIDEN E_i AVULLA.
MUTTA EMME TIEDÄ NIITÄ!

JOUKSSA $\{E_i\}$ TÄYTYN OLLA ALIN OMINAISARVO E_0 ,
JOKI ON PERUSTILAN VASTAANVA.

SIVUHKOMMUTUUKSINÄ \mathbb{R} , ETTÄ JOUKKO $\{E_i\}$ ON ALKUALTA
RÄJÖITETTU ON OLENNAINEN JA KRITINEN OSA KVANTTIMEK-
MIKKUA. ELEKTRONIN ORBITAALJA EI VOI KOTISTAA
MIELIVALTAVEN PIENIKSI (VET. KLASINEN TAPAU).

$$\text{TÄLLÖIN } \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - E_0 \langle \psi | \psi \rangle = \sum_i \underbrace{|c_i|^2}_{\geq 0} (\underbrace{E_i - E_0}_{\geq 0}) \geq 0$$

$$\Rightarrow \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle - E_0 \langle \psi | \psi \rangle \geq 0$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0}$$

HUOM! KUN $|\psi\rangle$ NORMITETTU
 $\langle \psi | \psi \rangle = 1.$

KUN ETSITÄÄN PERUSTILAN AALTOFUNKTIOTA, YRITTEEN HYVYTTÄ VOIDAAN MITATA ENERGIAN AVULLA: MITÄ MATALMPI, SEN PAREMPI!

$|\psi\rangle$ (YRITTE!) VOIDAAN RAUENTAA MITEN HALUAMME, MUTTA KÄYTÄNNÖSSÄ FYSIKAALISEN INTUITION KÄYTTÖ VOI AUTTAA; TEHDÄÄN JÄRKEVIÄ ALUOLETUJIA.

OLETETAAN SITTEEN, ETTÄ MEILLÄ ON YRITTE, JOUKO ON PARAMETREJEN $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots$ JNE. FUNKTIO $\tilde{\psi}$

$$\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots)$$

YRITTEEN ENERGIAT $E(\alpha_1, \alpha_2, \dots) = \frac{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle}$

JA OPTIMOIDAAN LAUSENE EMOILLA $\frac{\partial E}{\partial \alpha_i} = 0 \quad \forall i$

\Rightarrow YRITTEEN MUUNNEN PAREM ARVIO TODELLISESTA PERUSTILAN ENERGIASTA JA AALTOFUNKTIOSTA.

$$0 = \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \left(\frac{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle} \right) = \frac{\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle}{\langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle^2} \left(\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle - E \langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle \right)$$

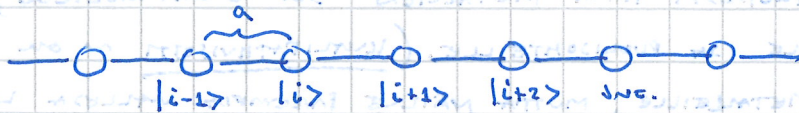
$$\langle \tilde{\psi} | \hat{H} | \tilde{\psi} \rangle = E \langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle$$

1. TIUKAN SIDOKSEN MALLI (TIGHT BINDING)

DRUDEN JA SOMMERFELDIN MALLIT KÄSITTELEVÄT METALLIEN VALENSSELEKTROONEJA, MUTTA EIVÄT MILLÄÄN LAILLA SELITÄ MIKSI JOITKUT MATERIAALIT OVAT METALLEJA (TAI ERISTEITÄ TAI PUOLIOHTEITA). TÄMÄN SELITTÄMINEN VAATII AINSAN ATOMIRAKENTEEN HUOMIOON OTTAMISEN.

TARKASTELEMME NYT YKSIKOKONAN KIDERTYKENTEITÄ JA NIITÄKIN YKSIKOKONASTAAN KÄSITTELYN 1D-ATOMIKETJUN TAPAKSI.

OLETTAAN KETJU, JOSSA ON IDENTISIÄ ATOMEJA TASAVÄLISIN (a) TOISIINSA NÄHDEN. KULLAKIN ATOMILLA ON NYT ALUSSI VAIN YKSI VALENSSELEKTROONI.



KULLAKIN ATOMILLA ON LISÄKSI VAIN YKSI VALENSSELEKTROONIN ORBITAALI, JOTA MERKITSEMME KYSEISÖN ATOMIN INDEKSILLÄ KETJUSSA, $|i\rangle$ (*).

KUN ATOMIT OVAT KAUKANA TOISIIN (a SUURI) JOHTAVUUS-ELEKTROONIN AALTOFUNKTIOT VASTAANVAI VYVÄLLÄ TARKKUUDELLA YKSIKOKONASTEN ATOMIEN ORBITAALISSA.

ESIM. Na, $1s^2 2s^2 2p^6 \underline{\underline{3s}}$
 ↑ VALENSSELEKTROONIN ORBITAALI

KUN ATOMEJA TUOHAAN KETJUSSA LÄHEMMÄKSI TOISIIN (a PIENENÖÖ), VIERIKKÄISTEN ATOMIEN ELEKTRONIORBITAALIT ALKUNAT PEITTÄÄ TOISIIN, ELEKTRONI VUOROVAIKUTTAVAT NAAPURIATOMIEN KANSSA JA VOIVAT "HYPPÄTÄ" ATOMILTA TOISILLE (TUNNELOITUA POTENTIAALI-KUOPASTA TOISEEN).

PAULI KIELTO-SÄNNÖSTÄ JOHTUVAN ELEKTROONIN ENERGIA-tiloihin TÄYTY TULLA MUUTOKSIA.

*) TÄMÄ KÄSITTELY VOIHAAN TARKKUNTA: LISÄKÄLLÄ ATOMIKOKONASTEN ORBITAALIEN MERKITÄ.

TIUKAN SIDOKSEN APPROKSIMAATIO:

- KUORIELEKTRONIEN ENERGIA-tilat eivät (juurikaan) muutu, vaan muuttuvat energiatiiloissa määrän ainoastaan VALENSSI-ELEKTRONIEN TAPAUKSESSA. (KUORIELEKTRONIT MALLISSA IMPLISIITTISETTÄ VAIN IONIN VARTUUSKUNTA.)
- VALENSSI-ELEKTRONIEN ORBITAALIT SÄILYTTÄVÄT KITEISIÄ YKSITTÄISTÄ ATOMIA VASTAANVAI LUONTEENSA. TOISIN SANOTTUNA ATOMIEN ORBITAALIEN PEITTO OLETETAAN KULLIN PIENENSI.

⇒ ELEKTRONIN ALTOFUNKTIO ATOMIORBITAALIEN

LINEARIKOMBINAATIONA (LCAO, LINEAR COMBINATION OF ATOMIC ORBITALS)

$$|\psi\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle$$

- MALLI YLEISESTI HYVÄ METALLIEN 3d-ELEKTRONEILLE, ERISTEILLE JA PUOLIOHTEILLE. (KVALITATIIVISESTI ~ ON MYÖS METALLEILLE, MUTTA NÄILLE PAROMPAA MALLISTA LÖYTYY HELPOSTI.)

ÄÄRÖLLISEN KETJUN TAPAUKSESSA (N ATOMIA) KERTOIMOT ϕ_n KETJUN PÄISSÄ EROISIVAT KULLA VASTAANVAI KETJUN KESKELLÄ.

MUTTA KOSKA MAKROSKOOPISILLE KITEILLE $N \sim 10^8$ VOIMME OLETTAA TURVALLISESTI, ETTE KETJUN PÄÄN KERTOIMIEN $\phi_n^{\text{PÄÄ}}$ VAIKUTUS ENERGIATILOIHIN ON MITÄTÖN.

⇒ PERIODISET REUNAEHDOT. "MITÄTÖN MUUTOS ENERGIATILOISSA, VALTAVA VAIKUTUS ANALYYTTISILLE TRUKTELUKSEKSI."

2. HAMILTONIN OPERAATTORI

OTAMME HUOMIOIMATTA ELEKTRONIEN VÄLISIT VUOROVAIKUTUKSET. MALLIMME VOIPAA TÄLLÖIN NÄHDÄ YKSIELEKTRONIMALLINA.

OLETETAAN, ETTÄ ATOMIORBITAALIT OVAT ORTONORMAALISOT JA ETTÄ JOHASTA ATOMIA KOHDEN ON VAIN YKSI ORBITAALI (MONIMUTAKEMPI TAPAUK LASKUVAIKUTUKSELLE).

VIRROITETAAN SITTEN HAMILTONIN OPERAATTORI ELEKTRONILLE

$$\hat{H} = \hat{K} + \sum_j V_j ; \hat{K} = \frac{p^2}{2m} \text{ KINETTINEN ENERGIA}$$

$$\hat{H}|m\rangle = (\hat{K} + V_m)|m\rangle \quad (1)$$

$$+ \sum_{j \neq m} V_j |m\rangle \quad (2)$$

$$V_j = V(\vec{r} - \vec{R}_j)$$

COULOMBIN VUOROVAIKUTUS ELEKTRONIN (PAIKAN \vec{r}) JA IONIN j (PAIKAN \vec{R}_j) VÄLILLÄ.

TULKITAAN TERMIT YLÄ.

(1) TÄMÄ ON YKSITTÄISEN ATOMIN m HAMILTONIN OPERAATTORI (T.V. ELEKTRONI ORBITAALILLA $|m\rangle$, EI MUITA IONEJA)

$$(\hat{K} + V_m)|m\rangle = E_{\text{atomic}} |m\rangle$$

HUOM! OLETAMME KAIKKI ORBITAALIT IDENTTISIKSI, JOTEN TÄMÄ ON JOHASTA ORBITAALIN $|m\rangle$ OMINAENERGIA

(2) ELEKTRONIN SÄHKÖSTAATTINEN POTENTIALIENERGIA VAIKUTTA MUIDEN IONIN $j \neq m$ KANSA. VOIMME MIKÄLÄÄN TÄMÄN HÄIRIÖKSI YKSITTÄISEN ATOMIN TAPAUKSELLE.

HUOM! TÄMÄ TERMI SAAT KAIKILLE ORBITAALILELLE $|m\rangle$, KOSKA ORBITAALIT OVAT IDENTTISIÄ JA KÄYTTÄMME PERIODISIA REUNAehtoja.

MÄÄRITETÄÄN SITEN MATRIISIELEMENTIT $H_{n,m}$

$H_{n,m} = \langle n | \hat{H} | m \rangle = E_{atomic} \delta_{n,m} + \sum_{j \neq m} \langle n | V_j | m \rangle$

- TARKASTELLAAN ENSIN TAPUSTA $n = m$, JOLLOIN JÄLJENNÄINEN TERMI

$\langle m | \sum_{j \neq m} V_j | m \rangle = V_0$

MERKITÄÄN $E_0 = E_{atomic} + V_0$

- SITEN TERMI $n = m \pm 1$ (VIEREKKÄISTEN ORBITAALIN TAPUS)

TERMI KUTSUU VIEREKKÄISET ORBITAALIT

$\langle m \pm 1 | \sum_{j \neq m} V_j | m \rangle = \int \varphi_{m \pm 1}^* \left(\sum_{j \neq m} V_j \right) \varphi_m dx$ (*)

JA KUVAA ELEKTRONIN HYPPÄMISTÄ (TUNNELOITUMISTA) VIEREKKÄISILLIS ORBITAALILLE.

HUOMAA MUIDEN IONIN SÄHUOSTAATTIVAN POTENTIAALI MADALTA POTENTIAALIVALLIA TUNNELOITUMISELLE.

MITÄ LÄHEMPÄÄ IONIT OVAT TOISIIN JA MITÄ SUUREMPI ON VIEREKKÄISTEN ORBITAALIN PEITTO INTEGRALISSA (*) YLLE, SEN "HELPOMMIN" ELEKTRONIT HYPPÄVÄT ORBITAALILTA TOISELLE.

MERKITSEMME $\langle m \pm 1 | \sum_{j \neq m} V_j | m \rangle = -t$

- LOPuksi YSINVERTAISTAMME MALLIA NIIN, ETTÄ ELEKTRONIT EIVÄT VOI HYPPÄÄ ENSIMMÄISTÄ LÄHINÄPURI ORBITAALIA KÄVEMMÄSI,

$\langle n | \sum_{j \neq m} V_j | m \rangle = 0 ; |n-m| > 1$

3. SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖN RATKAISU

$$\text{NYT SIIS } H_{n,m} = \underset{\substack{\uparrow \\ E_{\text{atomic}} + V_0}}{\epsilon_0} \delta_{n,m} - t (\delta_{n+1,m} + \delta_{n-1,m})$$

JA SCHRÖDINGERIN YHTÄLÖ ON MUOTOA

$$\sum_m H_{n,m} \phi_m = E \phi_n$$

MEILLÄ ON N TUNTEMATONTA (ϕ_n) JA N HOMOGEENISTA YHTÄLÖÄ. RATKAISUN VOISI PERIAATTEISTA SAADA VERTOIMION DETERMINANTIN KAUTTA TAVALLISEN TAPaan. MUTTA NYT N ON SUURI, JOTEN TÄMÄ TAPA ON TÄYSIN EPÄKÄYTÄNNÖLLINEN! SEN Sijaan ETSITÄÄN RATKAISUA SUORAAN (VISUAALIA)

YRITTEELLÄ

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna}$$

↑
NORMITUSTEKIJÄ

ASIAN RIIPPUMATON VÄSITTEEN, EI TÄRKEI-TERMIÄ $e^{i\omega t}$

OSOITETAAN TÄSSÄ VÄLISÄ, ETTÄ AALTOfUNKTIO

$$|\psi\rangle = |k\rangle = \sum_n \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna} |n\rangle$$

ON TOSIAAN NORMITETTU.

$$\langle \psi | \psi \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{ikna} e^{-ikma} \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{n,m}} = \frac{1}{N} \sum_n 1 = 1.$$

OK, HYVÄ. VOIMME JATKAA!

HUOM! TÄSSÄ PERIODISUT REUNAEHDOT, JOTEN

$$k = \frac{2\pi}{Na} m, \quad m \in \mathbb{Z} \quad \left| \quad k, \text{ k\u00e4t\u00e4 } \frac{2\pi}{a} m \quad \text{ANTAVAT SAMAN KUVAKUON}$$

TÄSSÄ k ON ELEKTRONIN KIDELIIVEM\u00c4\u00c4R\u00c4, EI VAPAAAN ELEKTRONIN LIIVEM\u00c4\u00c4R\u00c4.

TASOLANTOYRITTELY

$$\sum_{m,n} H_{n,m} \phi_m = \frac{\epsilon_0}{\sqrt{N}} e^{-ikna} - \frac{t}{\sqrt{N}} \left(e^{-ik(n+1)a} + e^{-ik(n-1)a} \right)$$

$$= \frac{e^{-ikna}}{\sqrt{N}} E$$

$$\Leftrightarrow E = \epsilon_0 - t \underbrace{\left(e^{-ika} + e^{ika} \right)}_{2 \cos(ka)}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{E = \epsilon_0 - 2t \cos(ka)} \quad \text{ENERGIAVYÖ}$$

ELEKTRONIN ENERGIA SEURÄ YLEISÄLTÄ EITÄ ALKUALTA RASOITETTU
(VST. VAPAIT HIUKKASIT).

* ENERGIAVYÖN LEVEYS $4t$, RIIPUU HYPPYTERMISTÄ t .

* ELEKTRONIN PÄÄNÄOPUS 1 BRILLOUININ VYÖHYKÖN REIÄLÄ

$$\left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k=\pm \frac{\pi}{a}} = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_{k=\pm \frac{\pi}{a}} = \underline{0}$$

Huomaa: Aaltofunktio $|\psi\rangle = |k\rangle = \sum_n \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikna} |n\rangle$

ON VAHETEUNAN e^{-ikna} JA ATOMIORBITAALIN
SUPERPOSITIO (KTS. LUENTODIAT).

4. HILA

1) ÄÄRTÖN JOUKKO DISKREETTÄ PISTETÄ JÄRJESTÄYTYNEINÄ
 NIIN, ETTÄ PISTEIDEN SUUNTAUTUMINEN JA JÄRJESTÄYTYMINEN
 NÄYTÄÄ TÄSMÄLLÖN SAMMUTA TARKASTELUPISTEEN VALINNASTA
 HUOLIMATTA (SYMMETRI!)

2) HILAN VIRITTÄVÄT ALKUSVEKTORIT (PRIMITIIVISOT VEKTORIT),
 JOITTA ANTAVAT JOUKON HILAN PISTÖN SISÄNNIIN
 KOKONAISLUKUKERTOIMISEN AVULLA.
 Esim. 2D:SSÄ HILAVEKTORI

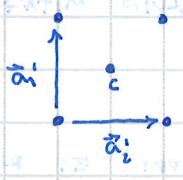
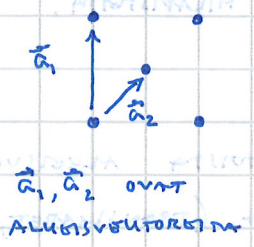
$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}_0)$$

ALKUSVEKTORIT $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$
 EIVÄT KAIKKI SAMMISA
 TA/OJIA.

3) HILA ON ÄÄRTÖN DISKREETTI JOUKKO
 VEKTORITA, JOSSA MIKÄ TÄMÄN KÄHDEN VEKTORIN
 SUMMA TUOTTA JOUKON JOUKON VEKTORIN.
 (T.S. JOUKKO SULJOTTU YHTÖN- JA VÄHENNYSLAUUSIA.)

HUOMAT: VEKTORIPIDON \vec{a}_i VALINTA EI OLE YKSILÖITTEINEN.

ESIMERKIN 2D:SSÄ



\vec{a}_1, \vec{a}_2 EIVÄT OLE ALKUSVEK-
 TORIT. MIKÄN
 NIIDEN KOKONAISLUK-
 KERTOIMINEN SUMMA
 EI VIE MOTTI ESIM.
 PISTÖSTÖN C.

HUOMAT: MIKÄ TÄMÄN PERIODINEN RAKENNE EI OLE HILA.
 (KTS: LUENTODIAT, HUUSAKENNORAKENNE).

TERMIT

LÄHINÄPULIT: HILAPISTÖT LÄHINÄ TIETTY HILAPISTÖTÄ
 (TÄMÖN MYÖS ATOMIILIS LIDORAKENTEISIA)

KOORDINAATOLUKU: LÄHINÄPULIDEN LUKUMÄÄRÄ.

5. ALKEIS- JA YKSIKÖKOPIIT

10

ALKEISKOPPI

TILAVUUS, JOKA SISÄLTÄÄ VAIN YHDEN HILAPISTON JA
JOKA SIIRRETTÄESSÄ KAIKILLA HILAVEKTOREILLA TÄYTTÄÄ
AVARUUDEN ILMAN AVUUKOJITTA / LIMITYMISTÄ / PEITTYMISTÄ.

ALKEISKOPIN VALINTA EI OLE YKSIKÄSITTEINEN, MUTTA
MÄÄRITELMÄN MUKAAN SEN TILAVUUS ON AINA SAMAT
KYSEISELLE HILALLE, $v = \frac{1}{n}$; $n = \text{HILAPISTEIDEN TIHEYS.}$

ALKEISVEKTORIHIN PERUSTOVA VALINTA OLISI NIIDEN
VIRITTÄMÄ SÄRMIO (KTS. LUENTODIAT) ELI PISTEET
 $\vec{r} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2 + x_3 \vec{a}_3$, JOSSA x_i
SAVAT KAIKILLI SÄRMION ARVOT VÄLILLÄ $[0, 1]$.

TÄMÄ ON KUITENKIN USEIN EPÄKÄYTÄNNÖLLINEN VALINTA,
KOSKA ESM. KUUTIOILLISILLE HILLOILLE EI HEIJASTA HILAN
SYMMETRIA. RATKESU TÄMÄN ONGELMAN ON...

WIGNER-SITZ - ALKEISKOPPI

ALKEISKOPIN MUODOSTAA SE OSA AVARUUTTA, JOKA ON LAHEMPANA
VALITUA HILAPISTETÄ KUIN MITÄÄN MUUTA HILAPISTETÄ.

(KTS. LUENTODIAT)

WIGNER-SITZ - ALKEISKOPPI EI RIIPU VALITUISTA ALKEISVEKTORISTA
JA HEIJASTA KYSEISEN HILAN SYMMETRIALLA (TRANSLAATIO, ROTAATIO,
PEITTYMISJNE.)

(KONVENTIOMALLINEN) YKSIKKÖKOPPI

TILAVUUS, JOKA TÄYTTÄÄ KOKO AVARUUDEN (ILMAN PÄÄLLEKÄÄSITYKSIÄ),
KUN SITÄ SIIRRETÄÄN LÄPI JONKUN HILAVEKTORIN OSAJOUKON.

(T.S. TOISTUVA KÄYÄ KYLPYHUONONNEN KÄMMELIEN TAPAAN.)

- YLEENSÄ SUUREMPI KUIN ALKEISKOPPI, ELI VOI SISÄLTÄÄ ENEMMÄN KUIN YHDEN HILAPISTEEN.
- VALITAAN SYMMETRIAN PERUSTEELLA, HELPOTTAA KÄYTÄNNÖN TARKASTELUJA.

ESIM. BCC:ILLE (FCC:ILLE) KUUTIO, JONKA TILAVUUS ON $\times 2$ ($\times 4$) ALKEISKOPIN TILAVUUS.

LUKUARNOJA, JOITA KUVAAVAT YKSIKKÖKOPIN SUURUUTTA
TÄMÄ KUTSUTAAN HILAVAKIOIKSI.

ESIM. ~~KUUTIO~~ KUUTIOILLISEN YKSIKKÖKOPIN TAPAUKSESSA
KUUTION SIVUN PITUUS (MERKITÄÄN YLEENSÄ a).

6. KIDERAUKENTOT

YLEISESTI OTTAEN MIKÄ TAHANSA PERIODINEN RAKENNE

VOIDAAN KUVAATA HILAN AVULLA. HILA ON KÄSNNKÖIN
POHJANA TOIMIVA VERKKO, JONKA JOHANSSEN PISTEeseen
KIINNITTÄMÄLLÄ TIETTY RAKENTEEN "AIHO" TUOTETAAN
PERIODINEN RAKENNE.

KIDERAUKENTEISSA TÄLLÄISTÄ AIHIOTA, TIETTYÄ ATOMIRYPÄSTÄ,
KUTSUTAAN KANNAKSI. (BASIS; EI SUKUA KVANTTILUKUNNISOLLE
KANNALLE).

SIIS: $\text{KIDE} = \text{HILA} + \text{KANTA}$

HUOM! ESIM. BCC- JA FCC-RAKENTEET OVAT HILLOJA (TÄYTTÄVÄT
HILAN MÄÄRITELMÄN), MUTTA NE VOIDAAN MYÖS ILMAISTA
MUODOSSA SC + KANTA.

(SIMPLE CUBIC, YKSIKERTAINEN KUUTIOHILA)

BCC:n TAPAUKSESSA KANTA ON $(0,0,0)$ JA $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$

JOSSE a ON SC-HILAN KUUTIOILLISEN YKSIKÖKÖPIN

HILANNUO, [ATOMIEN PAIKAT TÄSÄ ILMOITETTU MUODOSSA (x,y,z)]

FCC: LLE VASTAUVASTI KANTA ON

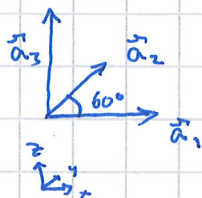
$(0,0,0)$, $(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0)$, $(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2})$ JA $(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2})$.

7. HEKSAGONALINEN TIIVISPAAKUTU RAKENNE

(HEXAGONAL CLOSE-PACKED, HCP)

ON KIDERTYKUNNUS, MUTTA EI HILTA (KTS. LUENTODIAT).
YLEISIN METALLIEN KIDERTYKUNNUS (N 30 ALKUAINUTTA).

YKSINKERTAINEN HEKSAGONALINEN HILTA



$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a \hat{x} \\ \vec{a}_2 &= 2a \hat{x} + \sqrt{3}a \hat{y} \\ \vec{a}_3 &= c \hat{z} \end{aligned}$$

~~HEKSAGONALINEN~~

HCP - RAKENNE

YLLÄ OLEVAT HILTA + KANTA $(0,0,0)$ JA $\frac{1}{3}\vec{a}_1 + \frac{1}{3}\vec{a}_2 + \frac{1}{2}\vec{a}_3$
(TS. YLIMÄÄRINEN ATOMITASO HILATASOJEN VÄLISSE.)

IDEALINEN PAKUUSTIHEYS (SAMAT KUIN FCC:LLÄ) KUIN $c = \sqrt{\frac{8}{3}}a$
 $\approx 1,63a$.