
PHYS-C0240 Materiaalfysiikka, kevät 2019

Laskuharjoitus 4. Palautus viimeistään perjantaina 17.5. klo 10.00.

Tehtävä 1.

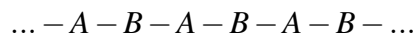
Yksiatominen tiukan sidoksen mallin ketju (**Simon 11.1, osittain**). Kirjassa on johdettu energiavyön lauseke

$$E = \varepsilon_0 - 2t \cos(ka).$$

- Johda tilatiheyden lauseke.
- Jos atomit ovat monovalentteja, mikä on tilatiheys Fermi-pinnalla?

Tehtävä 2.

Diatominen tiukan sidoksen mallin ketju (**Simon 11.2, osittain**). Oletetaan diatominen 1D-ketju,



Oletetaan lisäksi, että atomeihin liittyvät orbitaalien ominaisenergiat (yksittäisen atomin tapauksessa), $\langle n | \hat{H} | n \rangle$, ε_A ja ε_B , ovat eri suuret, mutta kaikki hyppytermit $-t$ ovat silti yhtä suuret.

- Määritä ketjun elektroninen dispersiorelaatio ja esitä se sekä taitetussa että laajennetussa esityksessä.
- Mitä tapahtuu nyt, jos $\varepsilon_A = \varepsilon_B$? Entä kun t laskee hyvin pieneksi atomien etääntyessä toisistaan (aina toisistaan ”eristettyjen” atomien rajalle asti)?
- Jos kumpikin atomityyppi A ja B ovat monovalentteja, onko systeemi metalli vai eriste? (Perustele vastauksesi huolellisesti.)

Tehtävä 3.

Lähinaapurit kuutiollisissa kiderakenteissa (**Simon 12.2, laajennettuna**). Tarkastellaan kuutiollisia kiderakenteita, joiden hilavakio on a . Määritä ionien lähinaapurien lukumäärä ja etäisyys, kun kiderakenne on

- yksinkertainen (simple cubic, SC)
- tilakeskinen (body-centered cubic, BCC)
- pintakeskinen (face-centered cubic, FCC)

Tehtävä 4.

Kiderakenteen pakkaustiheys (**Simon 12.4, hieman laajennettu**). Tarkastellaan kiderakennetta siten, että jokaisessa rakenteen pisteessä on kova pallo. Pallojen säde (sama kaikilla) valitaan siten, että lähinaapureiden pinnat koskettavat juuri toisiaan (kts. oppikirjan kuva 12.18). Kiteen pakkaustiheys määritellään sen rakennepallojen viemän tilavuuden suhteena kiteen kokonaistilavuuteen. Määritä pakkaustiheydet seuraaville kiderakenteille:

- yksinkertainen kuutiollinen (SC)
- tilakeskinen kuutiollinen (BCC)
- pintakeskinen kuutiollinen (FCC)
- ideaalinen heksagonaalinen tiheäpakkaus (HCP)