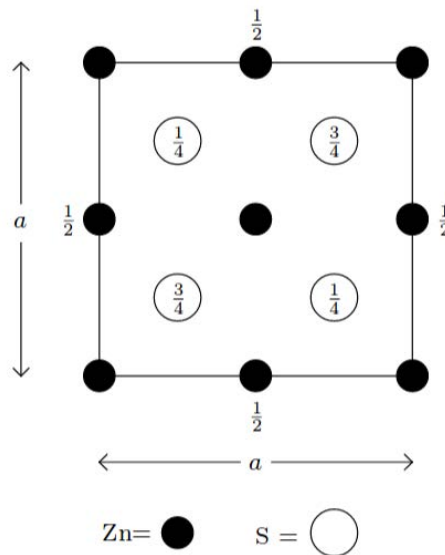

PHYS-C0240 Materiaalifysiikka, kevät 2019Laskuharjoitus 5. Palautus viimeistään perjantaina 24.5. klo 10.00.

Tehtävä 1.

Sinkkivälke (**Simon 12.3**). Kuvassa 1 on esitettyä sinkkivälkkeen ZnS rakenne tasonäkymänä, z -akselia pitkin alaspäin katsottuna. Joidenkin ionien kohdalla lukuarvot ilmoittavat niiden z -koordinaatin (korkeuden tasosta $z = 0$) yksikössä hilavakio a . Ionit, joiden kohdalla ei ole z -arvoa sijaitsevat tasoissa $z = 0$ ja $z = a$.

a) Mikä on tämän rakenteen hilytyyppi (Bravais-hila)?

b) Mikä on ZnS-rakenteen kanta?

c) Sinkkivälkkeen hilavakio on $a = 0,541$ nm. Laske lähinaapurietäisyydet pareille Zn-Zn, Zn-S, S-S.

Kuva 1: Sinkkivälkkeen ZnS konventionaalinen yksikkökoppi tasonäkymänä.

Tehtävä 2.

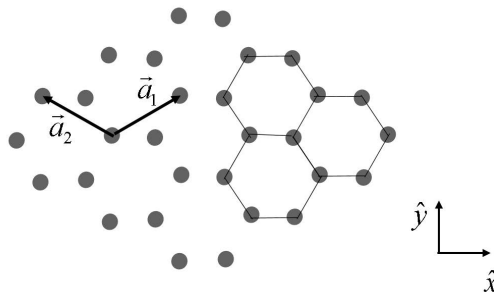
Tarkastellaan edellisen tehtävän sinkkivälkkeen kiderakennetta.

a) Piirrä ylläoleva kuva paperiisi ja osoita nuolella suunta $[210]$ sekä viivoilla tasojen (210) joukko.b) Piirrä toiseen vastaavaan kuvaan viivoin jokin rakenteen hilatasoperhe ja ilmoita sen Millerin indeksit (hkl) .c) Tarkastellaan sitten vielä pelkästään kuvan sinkki-ionien muodostamaa FCC-hilaa. Onko tasojen (210) joukko tämän rakenteen hilatasoperhe? (Perustele!) Mikäli ei ole, määritä normaaliltaan (210) :n kanssa samansuuntainen tasojoukko, joka on FCC-rakenteen hilatasoperhe.

Tehtävä 3.

Grafeenin kiderakenne ja käänteishila. Grafeenin kiderakenne ja alkeisvektorit on esitetty allaolevassa kuvassa.

- Määritä näitä alkeisvektoreita ja kuvan koordinaatistoa käyttäen grafeenin käänteishilan alkeisvektorit!
- Mikä on käänteishilan alkeisvektoreiden pituus?
- Piirrä grafeenin kidehila, alkeisvektorit ja niitä vastaava Wigner-Seitz -koppi. Piirrä sitten viereen käänteishila ja sen 1. Brillouin'n vyöhyke samassa xy-koordinaatistossa kuin kiderakenne (Suunnat pysyvät samoina mutta etäisyyksien laadut muuttuvat suoran hilan ja käänteishilan välillä)! Mikä yhteys on 1. Brillouin'n vyöhykkeellä ja Wigner-Seitz -kopilla?



Kuva 2: Grafeenin kiderakenne ja alkeisvektorit. Alkeisvektoreiden pituus on a .

Tehtävä 4.

(Simon 14.2) BaTiO_3 :lla on yksinkertainen kuutiollinen hilarakenne ja kanta (yksiköissä hilavakio a)

$$\text{Ba} \quad (0, 0, 0)$$

$$\text{Ti} \quad \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\text{O} \quad \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right), \quad \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right), \quad \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

- Piirrä rakenteen konventionaalinen yksikkökoppi
- Osoita, että röntgensironnan rakennetekijä Braggin heijastuksille $(00l)$ on

$$S_{(hkl)} = f_{\text{Ba}} + (-1)^l f_{\text{Ti}} + \left[1 + 2(-1)^l\right] f_{\text{O}},$$

jossa f_X on atomin X muototekijä.

- Määritä suhdeluku $I_{(002)}/I_{(001)}$, jossa $I_{(hkl)}$ on röntgensäteilyn sironnan intensiteetti tasoista (hkl) . Yksinkertaisuuden vuoksi voit olettaa, että atomien muototekijä on suoraan verrannollinen atomilukuun Z ja jättää huomioimatta sen riippuvuuden sirontavektorista.

$$(Z_{\text{Ba}} = 56, Z_{\text{Ti}} = 22, Z_{\text{O}} = 8.)$$