
PHYS-C0240 Materiaalifysiikka, kevät 2019

Laskuharjoitus 6. Palautus viimeistään **maanantaina 3.6. klo 16.00.**

Tehtävä 1.

- a) Osoita, että hilapisteiden tiheys pinta-alayksikköä kohti hilatasossa on d/V , missä d on k.o. hilatasojen välimatka ja V on alkeiskopin tilavuus.
- b) Päätele käyttämällä hilatasoperheiden ja käänteishilavektoreiden väistä yhteyttä, millä FCC:n ja BCC:n hilatasoilla on suurimmat hilapistertiheydet.

Tehtävä 2.

Osoita, että 3D tiukan sidoksen aproksimaation aaltofunktio (Suora yleistys 1D aaltofunktiosta)

$$|\Psi(\vec{r})\rangle = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \phi(\vec{r} - \vec{R})$$

toteuttaa Blochin teoreeman. Yllä $\phi(\vec{r} - \vec{R})$ on hilapisteeseen \vec{R} liitetty atomin aaltofunktio.

Tehtävä 3.

(**Simon 14.3**, lyhennettynä). Hyvin suunnattu säde monokromaattista röntgensäteilyä (aallonpituus $\lambda = 0,162$ nm) kohdistetaan palladiumnäytteeseen. Sironneen säteilyn intensiteettiä havaitaan kulmissa $42,3^\circ$, $49,2^\circ$, $72,2^\circ$, $87,4^\circ$ ja $92,3^\circ$ säteilytysuuntaan nähden.

- a) Määritä näiden tietojen avulla palladiumin hilatyypin, hilavakion ja lähinaapurietäisyys.
- b) Olettaen, että kannassa on vain yksi atomi, vastaako saamasi etäisyys palladiumin tunnettua massatiheyttä $12,023 \cdot 10^3$ kg/m³? (Palladiumin atomimassa on 106,4 amu.)

Tehtävä 4.

Divalentti metalli muodostaa kaksidimensioisen suorakaidehilan, jonka hilavakiot ovat a ja $b = 4a/3$. (Vihje: mieti Simonin sivun 176 kuvia.)

- a) Piirrä hila ja käänteishila vierekkäin samassa xy -koordinaatistossa. Piirrä kuvaan myös 1. Brillouin'in vyöhyke.
- b) Laske 2D vapaaelektronimallin Fermi-aaltovektorin pituus a :n avulla. Koskettaako se kaikkia Brillouin'in vyöhykkeen reunoja (Braggin tasoja)?
- c) Piirrä kuvaan miten Fermi-pinta muuttuu, kun periodinen potentiaali kytketään päälle ja voimistuu vähitellen.