

Jokainen tehtävä on 6 pisteen arvoinen. Tentin aikaraja 4h.

1. Selitä lyhyesti

- a) kiderakenne
- b) van der Waals vuorovaikutus
- c) Mikä on entalpiian ΔH ja entropian ΔS merkitys merkitys hilavirheiden energetiikassa? (Gibbsin vapaa energia voidaan kirjoittaa $\Delta G = \Delta H + T\Delta S$.)
- d) sp^3 -hybridi
- e) kemiallinen potentiaali μ
- f) tyhjennysalue

2. BCC-hilarakenne voidaan esittää primitiivi vektoreiden $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$ ja $\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ avulla, missä a on hilavakio.

- a) Määritä rakenteelle koordinaatio luku ja lähinaapuri etäisyys.
- b) Määritä, piirrä ja tunnista käänteishila annetulle BCC-hilarakenteelle ja määritä käänteishilan hilavakio.
- c) Laske koko 3-ulotteisen rakenteen pakkaustiheys $\eta = \frac{V_{\text{sphere}}}{V_{\text{unit cell}}}$ ja myös saman hilarakenteen 2-ulotteisen (111) pinnan pakkaustiheys $\eta = \frac{A_{\text{disk}}}{A_{\text{unit cell}}}$. A_{disk} kuvaa kiekkojen pinta-alaa ja V_{sphere} pallojen tilavuutta yksikkökoppia kohti.
- d) Hahmottele kaksi ensimmäistä Brillouinin vyöhykettä yksinkertaiselle kaksi ulotteiselle neliöhilalle.

3. Määritä liikeyhtälö periodiselle yksiulotteiselle monoatomiselle ketjulle, jonka atomien massa on m . Oleta, että atomien välillä vaikuttaa pelkästään harmoninen lähinaapuri vuorovaikutus jota kuvaa jousivakio K . Ratkaise dispersiorelaatio liikeyhtälöstä ja hahmottele ratkaisu ensimmäisen Brillouinin vyöhykkeen alueella. Kuinka äänen nopeus (ryhmänopeus) saadulle ratkaisulle käyttäytyy ensimmäisen Brillouinin vyöhykkeen alueella ja kuinka jousivakio vaikuttaa nopeuteen?

4. Selitä sähkönjohtavuuden lämpötilariippuvuus

- a) metalleissa (3 p)
- b) itseis- ja seostetuissa puolijohteissa (3 p)

5. a) Osoita että tight-binding (LCAO) aaltofunktio

$$\Phi_{ki} = N^{-1/2} \sum_n e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \phi_i(\vec{r} - \vec{R}_n) \quad (1)$$

täyttää Blochin teoreeman vaatimukset, ja että normalisaatiovakio on $N^{-1/2}$, missä N on kiteen atomien lukumäärä. (3 p)

b) Määritä lausekkeet kolmelle sp^2 -hybridille jotka muodustuvat s-orbitaalin ja p_x sekä p_y orbitaalien kombinaatioista. Osoita että hybridit makaavat $x-y$ tasossa, ja niiden välinen kulma on 120° astetta. (3 p)

$$\exp(ix) = \cos(x) + i \sin(x)$$

$$a + ar + ar^2 + ar^3 + \dots = \frac{a}{1-r}$$