

Jokainen tehtävä on 6 pisteen arvoinen. Aikaraja on 3 tuntia.

1. Selitä lyhyesti

- kiderakenne
- fraktaali-rakenteet
- Schottky pari
- värikeskus
- van der Waals vuorovaikutus
- Arrhenius käyttäytyminen

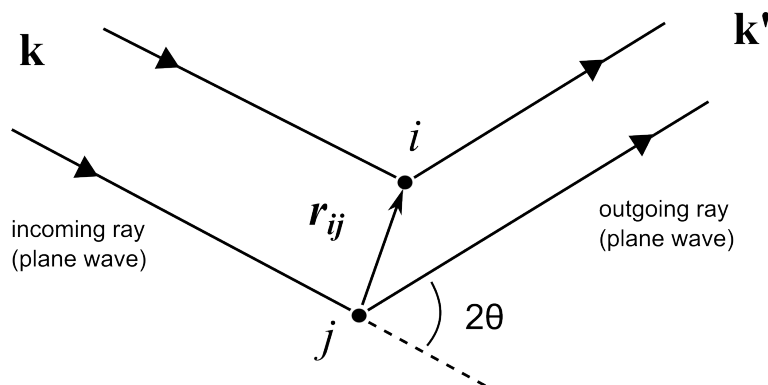
2. Yksi tietty reaaliavaruuden hilarakenne voidaan kuvata alkeisvektoreiden $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$ and $\mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$ avulla, missä a on hilavakio.

- Piirrä ja tunnista hilarakenne.
- Määritä hilarakenteen koordinaatioluku ja lähinaapurietäisyys.
- Laske rakenteen pakkaustiheys $\eta = \frac{V_{\text{spheres}}}{V_{\text{unit cell}}}$.
- Määritä, piirrä ja tunnista käänteishilan rakenne ja vastaava hilavakio.

Oleta, että yllä määritetyn reaaliavaruuden 3D-hilan (110)-taso muodostaa erillisen oman 2D-hilarakenteensa. Piirrä ja määrittele tälle uudelle 2D-hilalle

- alkeisvektorit
- Wigner-Seitz alkeiskoppi

3. Hyödyntämällä alla olevaa kuvaa (i ja j hilapisteitä), määritä Lauen ehto diffraktiolle kiteestä elastisessa siroinnassa. Toisin sanoen osoita, että $\mathbf{K} = \mathbf{G}$, missä $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ on sirontavektori, \mathbf{k} ja \mathbf{k}' ovat tulevan ja lähtevän tasoallon aaltovektorit ja \mathbf{G} on käänteisavaruuden hilavektori. Selitä välivaiheet selkeästi ja piirrä tarvittaessa havainnollistavia kuvia! Mikä on Braggin tasojen ja rakennetekijän tulkinta ja merkitys kiderakenteiden diffraktioon liittyen?



4. a) Johda periodisen yksiulotteisen atomiketjun atomien dynamiikalle dispersiorelaatio $\omega(k)$, kun atomeilla on identtinen massa M ja ketjun vierekkäiset atomit on kytketty identtisillä jousilla, jousivakio K . Toisin sanoen oleta, että atomien välillä vaikuttaa harmoninen lähinaapurivuorovaikutus. Hahmottele dispersio-käyrä ja merkitse siihen Brillouinin vyöhykkeen rajat. Mitkä ovat ryhmänopeudet

Brillouinin vyöhykkeen rajalla ja keskellä? Tunnista värähtely haaran tyyppi (akustinen tai optinen). Selitä kvalitatiivisesti kuinka dispersiorelaatio muuttuisi, jos vuorovaikutukset lähimpiä atomeja kauempiin atomeihin otettaisiin myös huomioon.

b) Määritä lämpökapasiteetin lauseke yksittäiselle harmoniselle oskillaattorille. Aloita kirjoittamalla systeemin sisäenergia (toisin sanoen lämpötilan suhteen keskiarvoistettu kokonaisenergia). Miksi systeemin energia ei ole nolla kun $T = 0$?

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

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