

1. Hiili- ja heliumatomien välisen Lennard-Jones-potentiaalin parametrit ovat $n = 12$, $\epsilon = 1.5 \text{ meV}$ ja $\sigma = 0.3 \text{ nm}$. Olkoon heliumatomi pisteessä \mathbf{r}_0 etäisyydellä h tasaisesta hiilipinnasta (hiili täyttää koko pinnan takaisen puoliavaruuden; hiilen atomien tiheys on n_0).

(a) Perustele lyhyesti, että heliumatomiin kohdistuvaa potentiaalia voidaan järkevästi approksimoida lausekkeella $U(\mathbf{r}_0) = n_0 \int V_{LJ}(|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|) d^3r$, missä integraali ulottuu yli koko jatkuvaksi oletetun hiilen.

(b) Laskemalla integraali näytetään, että etäisyyden h funktiona U on muotoa

$$U = \frac{a}{h^9} - \frac{b}{h^3}.$$

Mitä ovat parametrit a ja b ?

(c) Millä heliumatomin etäisyydellä potentiaali U on minimissään? Jos hiilen tiheys on $n_0 = 113 \text{ atomia/nm}^3$, niin mikä on minimipotentiaalin arvo?

(d) Mitä luokkaa pitäisi lämpötilan olla, jotta hiilen pinnalle alkaisi muodostua heliumkerros. (BM 10-15)

2. Kuvassa on bromivedyn HBr värähtely-rotatio-spektri. Määritä sen avulla \hbar^2/I (I hitausmomentti) ja $\hbar\omega$ sekä lopulta ytimien välinen tasapainoetäisyys R_0 . Jos vielä tiedetään, että dissosiaatioenergia on 3.797 eV , niin määritä tähän sopivat Morsen potentiaalin parametrit.

3. Kirjan kuvasta 10-21 (alumiinioksidin emissiospektri) määritä elektronisen virityksen osuus $\Delta\epsilon$ ja värähtelykulmataajuudet ω_0 ja ω'_0 .

4. Yksinkertainen kuutiollinen kiderakenne on yksinkertaisesti pino kuutiollisia koppeja.

(a) Tarkastele mielivaltaista atomia hilassa. Moniko alkeiskoppi jakaa tämän atomin omistusoikeuden?

(b) Tarkastele mielivaltaista alkeiskoppia. Kuinka monesta atomista tällä kopilla on osuus?

(c) Jos tarkastellaan hilaa kokonaisuutena, niin montako atomia siellä on yksikkökoppia kohti?

(d) Jos tarkastellaan tilakeskistä kuutiollista hilaa, niin montako atomia siinä on yksikkökoppia kohti?

5. Cesiumkloridin kiderakenteessa Cs^+ - ja Cl^- -ionit ovat järjestyneet kahteen identtiseen yksinkertaiseen kuutiolliseen (SC) hilaan. Cl^- -hila on kuitenkin siirtynyt Cs^+ -hilan suhteen niin, että kukin Cl^- -ioni on Cs^+ -ionien muodostaman kuution keskellä (ja toisin päin). Tällöin siis CsCl-alkeiskoppi näyttää samalta kuin tilakeskinen kuutiollinen (BCC) koppi paitsi, että keskellä erilainen ioni. Jos suolan tiheys on 3.97 g/cm^3 , niin päättele CsCl-yksikkökopin sivun pituus. Mikä on lähinaapurietäisyys?