1. *Laske käänteishilan kantavektorit a) FCC-hilalle ja b) BCC-hilalle. c) Mitkä hilat nämä käänteishilat muodostavat?*

Käänteishilavektorit yleisesti: $\mathbf{A} = 2\pi \dfrac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}$, $\mathbf{B} = 2\pi \dfrac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}$ ja $\mathbf{C} = 2\pi \dfrac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}$.

a) FCC-hilan alkeisvektorit: $\mathbf{a} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}\right)$, $\mathbf{b} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{j}+\hat{k}\right)$ ja $\mathbf{c} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{k}+\hat{i}\right)$.

$\mathbf{A}$:n osoittaja on $\mathbf{b}\times\mathbf{c} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \left(\hat{i}+\hat{j}+0-0-0-\hat{k}\right) = \dfrac{d^2}{4}\left(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}\right)$

Kaikissa käänteishilavektoreissa nimittäjä on $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}\right)\cdot\dfrac{d^2}{4}\left(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}\right) = \dfrac{d^3}{4}$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = 2\pi \frac{\frac{d^2}{4}\left(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}\right)}{\frac{d^3}{4}} = \frac{2\pi}{d}\left(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}\right)$$

$\mathbf{B}$:n osoittaja on $\mathbf{c}\times\mathbf{a} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \left(-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}\right) = \dfrac{d^2}{4}\left(-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}\right)$.

$$\Rightarrow \quad \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = 2\pi \frac{d^2/4}{d^3/4}\left(-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}\right) = \frac{2\pi}{d}\left(-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}\right)$$

$\mathbf{C}$:n osoittaja on $\mathbf{a}\times\mathbf{b} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \left(\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}\right) = \dfrac{d^2}{4}\left(\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}\right)$.

$$\Rightarrow \quad \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = 2\pi \frac{d^2/4}{d^3/4}\left(\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}\right) = \frac{2\pi}{d}\left(\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}\right)$$

b) BCC-hilan alkeisvektorit: $\mathbf{a} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}\right)$, $\mathbf{b} = \dfrac{d}{2}\left(-\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}\right)$ ja $\mathbf{c} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{i}-\hat{j}+\hat{k}\right)$.

$\mathbf{A}$:n osoittaja on $\mathbf{b}\times\mathbf{c} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \left(\dfrac{d}{2}\right)^2 \left(\hat{i}+\hat{j}+\hat{k}-\left(-\hat{i}\right)-\left(-\hat{j}\right)-\hat{k}\right) = \dfrac{d^2}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}\right)$.

Kaikissa vektoreissa nimittäjä on $\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c} = \dfrac{d}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}-\hat{k}\right)\cdot\dfrac{d^2}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}\right) = \dfrac{d^3}{2}$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = 2\pi \frac{\frac{d^2}{2}\left(\hat{i}+\hat{j}\right)}{\frac{d^3}{2}} = \frac{2\pi}{d}\left(\hat{i}+\hat{j}\right)$$

$\mathbf{B}$:n osoittaja on $\mathbf{c}\times\mathbf{a} = \left(\frac{d}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = \left(\frac{d}{2}\right)^2 \left(2\hat{j}+2\hat{k}\right) = \frac{d^2}{2}\left(\hat{j}+\hat{k}\right).$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{B} = 2\pi\frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = 2\pi\frac{d^2/2}{d^3/2}\left(\hat{j}+\hat{k}\right) = \frac{2\pi}{d}\left(\hat{j}+\hat{k}\right)$$

$\mathbf{C}$:n osoittaja on $\mathbf{a}\times\mathbf{b} = \left(\frac{d}{2}\right)^2 \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \left(\frac{d}{2}\right)^2 \left(2\hat{i}+2\hat{k}\right) = \frac{d^2}{2}\left(\hat{i}+\hat{k}\right).$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{C} = 2\pi\frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = 2\pi\frac{d^2/2}{d^3/2}\left(\hat{i}+\hat{k}\right) = \frac{2\pi}{d}\left(\hat{i}+\hat{k}\right)$$

c) FCC:n käänteishila on BCC ja BCC:n FCC.

2. *a) Laske käänteishilan kantavektorit yksinkertaiselle heksagonaaliselle hilalle. b) Laske, millä suhteella c/a tämä suhde säilyy ennallaan käänteishilassa.*

a) Käänteishilavektorit: $\mathbf{A} = 2\pi\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}$, $\mathbf{B} = 2\pi\frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}$ ja $\mathbf{C} = 2\pi\frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}}$.

SH-hilan alkeisvektorit $\mathbf{a} = a\,\hat{i}$, $\mathbf{b} = \frac{a}{2}\hat{i} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{j}$, $\mathbf{c} = c\,\hat{k}$

Osoittaja $\mathbf{b}\times\mathbf{c} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}a}{2} & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{3}ac}{2}\hat{i} - \frac{ac}{2}\hat{j}.$

Nimittäjä on kaikissa $a\hat{i}\cdot\left(\frac{\sqrt{3}ac}{2}\hat{i} - \frac{ac}{2}\hat{j}\right) = \frac{\sqrt{3}a^2c}{2}$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{A} = 2\pi\frac{\mathbf{b}\times\mathbf{c}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = \frac{2\cdot 2\pi}{\sqrt{3}a^2c}\left(\frac{\sqrt{3}ac}{2}\hat{i} - \frac{ac}{2}\hat{j}\right) = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} - \frac{1}{2}\hat{j}\right)$$

Osoittaja $\mathbf{c}\times\mathbf{a} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ 0 & 0 & c \\ a & 0 & 0 \end{vmatrix} = ac\,\hat{j}.$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{B} = 2\pi\frac{\mathbf{c}\times\mathbf{a}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = \frac{2\cdot 2\pi}{\sqrt{3}a^2c}\cdot ac\,\hat{j} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\hat{j}$$

Osoittaja $\mathbf{a}\times\mathbf{b} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ a & 0 & 0 \\ \frac{a}{2} & \frac{\sqrt{3}a}{2} & 0 \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{3}a^2}{2}\hat{k}.$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{C} = 2\pi\frac{\mathbf{a}\times\mathbf{b}}{\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}\times\mathbf{c}} = \frac{2\cdot 2\pi}{\sqrt{3}a^2c}\cdot\frac{\sqrt{3}a^2}{2}\hat{k} = \frac{2\pi}{c}\hat{k}$$

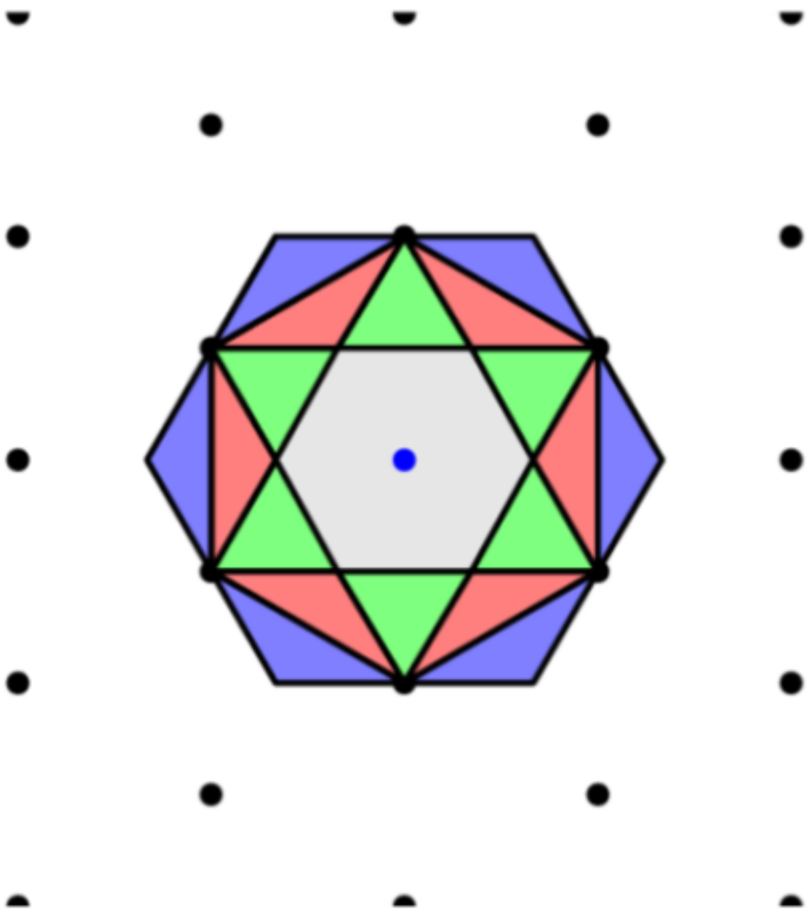
b) $\dfrac{|\mathbf{C}|}{|\mathbf{A}|} = \dfrac{c}{a} \quad \Rightarrow \quad \dfrac{|\mathbf{C}|}{|\mathbf{A}|} = \dfrac{|\mathbf{C}|}{|\mathbf{B}|} = \dfrac{2\pi}{c} \div \dfrac{4\pi}{\sqrt{3}a} = \dfrac{2\pi\sqrt{3}a}{2\cdot 2\pi c} = \dfrac{\sqrt{3}a}{2c} = \dfrac{c}{a}$

$$\Rightarrow \quad c^2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 \quad \Rightarrow \quad c = \sqrt{\frac{\sqrt{3}}{2}}a \approx 0{,}93\, a\,.$$

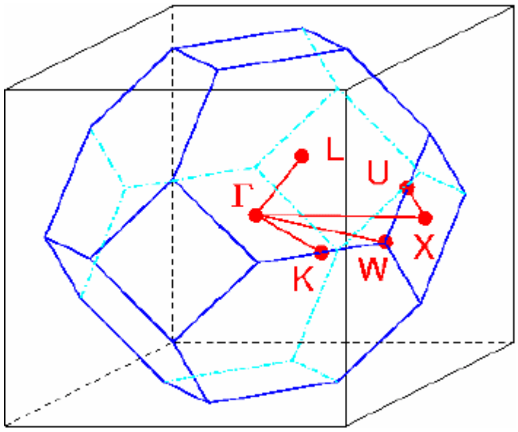
3. *Piirrä neljä ensimmäistä Brillouin vyöhykettä kaksiuloitteiselle, tasasivuisista kolmioista muodostuvalle hilalle (heksagonaalinen hila). Piirrä kuvasta koko sivun kokoinen ja käytä harppia tai korvaavaa tekniikkaa, jotta saat kolmioista tasasivuisia ja lopputuloksesta selkeän.*

Kuvan värit:

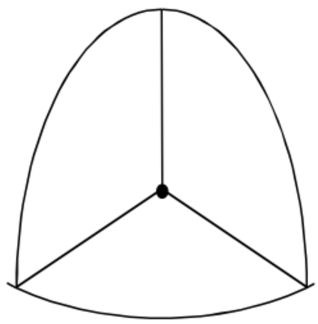
1. Brillouinin vyöhyke	harmaa
2. Brillouinin vyöhyke	vihreä
3. Brillouinin vyöhyke	punainen
4. Brillouinin vyöhyke	violetti



4. *Perustele viereistä kuvaa apuna käyttäen, että FCC-hilan ensimmäinen Brillouinin vyöhyke voidaan redusoida 1/48-osaan käyttäen apuna vyöhykkeen symmetriaa. Tätä osaa peilaamalla ja kiertämällä voidaan palauttaa koko vyöhyke. Luennon 2 sivulta 15 löytyy oheisen kuvan pisteiden koordinaatit. (Vihje: pura symmetriaa avaruuskulmia ajattelemalla.)*



Ensin havaitaan, että jokaisen koordinaattiakselin suuntaan, 1. Brillouinin vyöhyke on symmetrinen peilaukseen 0-tason suhteen. Tämä supistaa symmetriaa $1/2^3$ -osaan eli $1/8$-osaan.



Jäljelle jää yksi koordinaattiakselien rajoittama sektori avaruuskulmista (kuvassa oikealla). Jos tätä aluetta katsotaan L-pisteen suunnasta, on näkymä kuvan kaltainen (vektori L-pisteeseen tulee suoraan kohti, musta piste kuvassa). Tämä jakaa avaruuskulmat $1/3$-osaan.

Lisäksi kuvassa alimman osan jakaa $1/2$-osaan K-piste. Tällöin on saatu rajoitettua vektoreiden $\Gamma\mathrm{K}$, $\Gamma\mathrm{L}$ ja $\Gamma\mathrm{X}$ rajoittama avaruuskulma-alue, jota monistamalla saadaan koko 1. Brillouinin vyöhyke. Alue on $1/(8\cdot 3\cdot 2) = 1/48$ koko vyöhykkeestä.