

Cvičenie 2

A (1 bod)

Nájdite primitívne vektory pre hcp kryštál gulí s polomerom $a/2$. Nájdite súradnice bázy.

B (1 bod)

Vypočítajte sumy $A_n = \sum_{\mathbf{x} \neq 0} |\mathbf{x}|^{-n}$, kde $\mathbf{x}$ sú spojnice referenčného bodu mriežky s ostatnými mriežkovými bodmi. Veľkosť najmenšieho nenulového vektora nech je $|\mathbf{x}| = 1$. Výpočet urobte pre $n = 6$ a $n = 12$ pre fcc, bcc a hcp mriežku. Určte, ktorá mriežka by mala byť stabilná pre atómy s Lennard-Jonesovými interakciami.

C (1 bod, prémiová úloha)

Vypočítajte Madelungovu sumu pre mriežku typu NaCl.