

Cvičenie

1. Vypočítajte sumy $A_m = \sum_{\vec{x} \neq 0} \frac{1}{x^m}$ kde $\vec{x}$ sú spojnice referenčného bodu siete s okolujúcimi bodmi. Pri tom veľkosť najmenšieho vektora $\vec{x}$ uvažujte = 1. Vypočítajte hodnoty pre fcc a pre bcc siete pre $m=6$ a $m=12$.
2. Na základe bodu 1 rozhodnite, či kryštály iherbych plynov kryštalizujú v fcc alebo bcc štruktúrach.

- 3.* Vypočítajte Madelungovu sumu pre sieť NaCl,

$$\alpha = - \sum'_{k,l,m} \frac{(-1)^{k+l+m}}{\sqrt{k^2 + l^2 + m^2}}$$

(to sumy je vyňatý prípad $k=l=m=0$)

Návod pre výpočet hromadnou silou:

Počítajte $\alpha(N) = - \sum_{k=-N}^N \sum_{l=-N}^N \sum_{m=-N}^N \frac{(-1)^{k+l+m}}{\sqrt{k^2 + l^2 + m^2}}$

Študujte limitu $\alpha(N)$ pre $N \rightarrow \infty$.