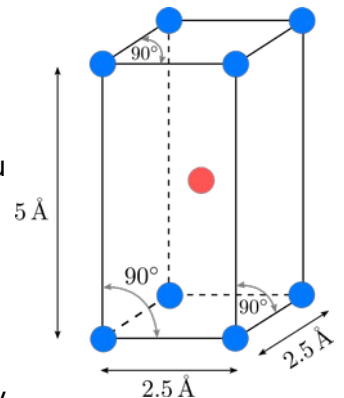


**DOMÁCE ÚLOHY 01**  
 Teória kondenzovaných látok  
 UFV/TKL1/99 prednášajúci Martin Gmitra  
 Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA

- [1 bod] Uvažujte BCC mriežku rovnakých tvrdých dotýkajúcich sa guľôčok a vypočítajte polomer gule  $R$  pre danú mriežkovú konštantu  $a$ .
- [3 body] Vypočítajte
  - objem (primitívnej) jednotkovej bunky BCC mriežky
  - objem recipročnej mriežky, ktorá je recipročná k FCC mriežke v priamom priestore
  - objem Wignerovej-Seitzovej bunky v recipročnom priestore BCC mriežky
- [1 bod] Dokážte, že recipročná mriežka recipročnej mriežky je mriežka v priamom priestore.
- [1 bod] Dokážte, že recipročna mriežka BCC mriežky je FCC mriežka a naopak.
- [2 body] Uvažujte trojuholníkovú v dvoch rozmeroch s mriežkovými vektormi  $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}$ ,  $\mathbf{a}_2 = (a/2)\hat{x} + (a\sqrt{3}/2)\hat{y}$ .
  - Nájdite prvú Brillouinovú zónu a napíšte výraz pre ekvivalentné vlnové vektory v prvej Brillouinovej zóne.
  - Nakreslite druhú Brillouinovú zónu.

- [2 body] Obrázok vpravo ukazuje jednotkovú bunku kryštálu s dvoma rôznymi atómami v relatívnych polohách  $(000)$  a  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ .
  - Akú Bravaisovu mriežku by ste prisúdili tomuto kryštálu a akú hodnotu má atómový plniaci faktor? Pozri: [atomic packing factor](#) na wikipedia.
  - Načrtnite atómové roviny pozdĺž smerov  $[111]$ ,  $[110]$  a  $[210]$ .



- [3 extra body] Mriežkové roviny priamej mriežky môžu byť charakterizované vektormi recipročnej mriežky tak, že sú to kolmé vektory na mriežkové roviny. Označiť mriežkové roviny je možné pomocou Millerových indexov  $(hkl)$ .
  - Ukážte, že recipročný mriežkový vektor  $\mathbf{b}_{(hkl)} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$  je kolmý na mriežkovú rovinu  $(hkl)$  v priamom priestore.
  - Ukážte, že vzdialenosť  $d$  od rovín  $(hkl)$  v kubickom kryštály s mriežkovou konštantou  $a$  je  $d = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ .
  - Nájdite zovšeobecnenie vzťahu pre vzdialenosť od rovín b) pre ortorombický kryštál.
- [2 extra body] V slabo interagujúcich systémoch, interakcia medzi dvoma atómami  $i$  a  $j$  je často popísaná Lennardovým-Jonesovým potenciálom,  $U(r_{ij}) = 4\epsilon((\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6)$ , kde  $r_{ij}$  je interatomárna vzdialenosť. Blízko  $T = 0$  K, krypton je FCC kryštál s  $\sigma = 0.365$  nm a  $\epsilon = 2.25 \cdot 10^{-21}$  J. Vypočítajte mriežkovú konštantu a väzobnú energiu pripadajúci na jeden atóm uvažujúc len interakcie medzi najbližšími atómami.

**DOMÁCE ÚLOHY 01**  
Teória kondenzovaných látok  
UFV/TKL1/99 prednášajúci Martin Gmitra  
Zimný semester 2024, miestnosť KNKTFA

