

第一次小考

(explorers)

一、进行Si primitive cell 的能带结构计算，画出含最接近之三个原子共面的slice。

(schetch)

二、画出一个C60 结构，其每个六边形接有三个五边形，且每个五边形都与五个六边形相接。

(surface)

三、建立一个Pt (111) 表面超晶胞，把表面积扩大四倍后，在表面其中一颗上方吸附一个CO 分子（CO 以C 端接上金属原子）。

(nano)

四、建构一支内直径超过8 Angs 的单壁无限长扶手椅式的单根碳管模型，确保与近邻的周期影像隔开10 Angs 以上，且超晶胞向量的夹角皆为直角。

(vis tools)

五、自行载入或建构一个超过一百个原子的超晶胞，对之制作一张近视法(交叉视线法) 立体对图。