

# USTC 2016 第二次小考

## (UV/Vis)

一、计算并比较钻石、苏联钻(cubic zirconia,  $ZrO_2$ )与方石英(high cristobalite,  $SiO_2$ )的折射率(模型在Materials Studio结构资料匣中都可以找到)。为什么苏联钻可以假冒钻石?

## (Core-level)

二、 $TiO_2$ 的anataze与rutile两种相,如何透过电子能量损失谱加以区分?要看那一个元素及其那一个芯能级,比较容易看出差异?

## (Phonon)

三、计算平面silicene (硅烯)的声子谱,并分析Gamma点上各声子的振动方式。(提示:使用预设的norm-conserving Si pseudopotential时,silicene的a. b边长约为3.9 Angs。)

## (Polarizability)

四、得出cubic  $HfO_2$ 在波数是400  $cm^{-1}$ 的低频介电常数。(cubic  $HfO_2$ 结构与high cristobalite相同,而其conventional cell的晶胞边长是5.07 Angs。)

## (IR / Raman)

五、水源中沼气(甲烷,  $CH_4$ )含量若高,自来水厂加氯消毒的步骤易产生致癌物三氯甲烷( $CHCl_3$ ),这两种分子,在红外吸收谱上有什么较明显的差别?