

# 2016 USTC MS-CASTEP 期末作業

(7月29日中午12:00之前要寄到 e-mail 信箱 "ustc\_castep@163.com")

(surface)

一、模拟 GaAs(110) 在 +2.0 V 及 -2.0 V 偏压下的 STM 影像。

(defect / VCA)

二、使用 VCA 方式计算不同混合比例的 NiCu 合金的磁性（每个原子的自发磁化率），请在 fcc conventional cell 下来进行，从  $\text{Ni}_{1.0}\text{Cu}_{0.0}$ 、 $\text{Ni}_{0.9}\text{Cu}_{0.1}$ 、 $\text{Ni}_{0.8}\text{Cu}_{0.2}$ 、...、 $\text{Ni}_{0.0}\text{Cu}_{1.0}$  共 11 种情况的计算。

(TS)

三、在铝表面 (001) 上沿 (100) 方向的自扩散，有交换及跨越两种可能的机制。比较那一种的位势壘较低。

(MD)

四、振动 (声子或光谱) 计算及 分子动力计算 都可以获得振动频率，比较这两种方法所预测之  $\text{N}_2$  分子振动频率的结果。

(general)

五、怎么样向审稿人及读者证明你的计算是正确的？