

中科大CASTEP / MS 2016 期中考试

(atoms and molecules)

一、在使用不同之交换关联能LDA 与GGA-PBE 的情况下，比较基态(顺磁性，即三重态) 氧分子的键能。

(bond order)

二、基于乙烷(C_2H_6)、乙烯(C_2H_4)、乙炔(C_2H_2)的基准，分析比较双原子分子 C_2 与 N_2 的键级。

(BS n PDOS)

三、由态密度的所读出的能隙，与由能带结构计算结果算读出者不相同，为什么会这样？如何解决？

(advanced BS)

四、自行建构并几何结构优化一个内有8个原子的立方 $Al_3 GaN_4$ 晶胞，即相当于Zinc Blende (ZnS)结构的 $Al_{0.75} Ga_{0.25} N$ ；并画出相当于ZnS最小晶胞(原胞)之最低能量的导带在 Γ 点处的波函数。

(magnetism)

五、为什么电磁铁要采用铁芯？试比较锰、铁、钴、镍低温下的磁矩大小。（太高温会消磁，在此不探讨。）