

USTC CASTEP / Materials Studio 2015 指定考题

(openbook, take-home)

一、证明BCl₃ 是平面分子，且[BCl₃]⁻ 是立体分子（即三个B-Cl 键不共面）。

二、预测铜、银、金的颜色。

三、验证平面排列的独立单层硅烯结构并不稳定，并预测此一不稳定性的是倾向于什么样的结构变化。

四、MnO 反铁磁态（自旋方向沿(1 1 1) 面交替）比铁磁态者总能量低。

五、如果你要利用EELS 能谱来区分rutile 与anatase 这两种TiO₂，你会建议量何种元素的什么谱线？

六、找出铍金属Be(0001) 的表面态，确认其能量位置及空间分布。

七、SiO₂ 的光学性质吸收光谱，受到那一个元素的影响较多？

八、ZnO 的拉曼光谱在0 GPa、10 GPa、20 GPa 下各有何不同？

九、重构与不重构的Si(100) 表面，功函数差多少？

十、[CoCl₆]⁴⁻ 的六个Co-Cl 键有什么长短上的不同？