

2020 CASTEP 暑期课期末考试

- 一、顺磁基态氧分子的键能大约5eV，LDA 与GGA/PBE 结果有什么不同。
- 二、体心铁的磁矩大约是2.2 Bohr 磁子。
- 三、砷是间接带隙半导体，且其能隙值是1.1 eV。
- 四、石墨的层间距大约7 埃。
- 五、铝的C44 是28 GPa 。
- 六、鉴别奈米尺度样品的钻石与石墨，建议一个实验并以计算示范。
- 七、单层平面硅烯结构上不稳定，石墨烯则不然。
- 八、铝的声速是6305 m/s。
- 九、钨上面盖一层铂，功函数降或升？
- 十、镍铜合金在镍尚存40% 时，已无磁性。（提示 $37.5\% = 3/8 = 1.5/4 = 12/32$ ）