

第一次小考

- 一、建构一个 C_2H_4 分子，并且放入一个超晶胞中。
- 二、建立一个正十二面体 C_{20} 立体球模型。
- 三、将Si的晶胞模型改显示为近者大远者小的方式。
- 四、建立一个无限长度延伸的、(6, 6)碳纳米管模型，置于超晶胞中，确保与旁边的周期性影像相距10 Ang. 以上。
- 五、从ICSD（无机晶体结构资料库）找出 $CsGeCl_3$ 的晶体结构，并将之载入Materials Studio中。
- 六、建立一个钨W金属(111)表面，厚度六个原子层以上的slab超晶胞模型。
- 七、建构一个内半径8 埃(砷)，外壳层厚6 埃(锗)的砷锗同心奈米球。