

## 第二次作业

- 一、自选一个碳与氧的赝势，针对钻石排列的结构，进行平面波截止动能对总能收敛性测试，并比较之。
- 二、基于 $C_2H_2$ （乙炔）、 $C_2H_4$ （乙烯）、 $C_2H_6$ （乙烷）的键级趋势，评估 $C_6H_6$ （苯）的键级。
- 三、透过CASTEP 计算，阐明一维（等间距）的氢原子排列会不稳定的机理。
- 四、Ge 是直接能隙、还是间接能隙？那著名蓝光LED 材料GaN 呢？
- 五、调整Hubbard U，使NiO 可以重现实验能隙。