

USTC 2018 第四次作业

- 一、找出六角晶相金属钛Ti(0001) 的表面态，并用轨域密度确定。
- 二、比较钠Na 与钨W 功函数。
- 三、计算Si 长在Ge (111) 面上之接合面的价带偏移。
- 四、以分子动力方法估计出氯气分子Cl₂ 的振动频率，并且再由声子计算（ Γ 点）加以确认。
- 五、钋(Po) 被认为是简单立方结构，文献上有没有争议？如何以计算厘清？
- 六、染料敏化太阳能电池有时使用二氧化钛作为电极，如果你要区别所制出的材料样品是锐钛矿(rutile) 相还是金红石(anatase) 相，你会建议用什么仪器以及如何去鉴别它们？