

第一原理材料計算進階課程

2022 Summer School on First Principles Computational Materials Research - Advance Level

您的姓名: _____ 學校系所單位: _____

職稱:

博士生 (博一 博二 博三 博四 博五)

碩士生 (碩一 碩二) 大學生 (大一 大二 大三 大四)

其他: _____

200字參加動機與未來研究規劃:

推薦教授資料

(請務必請您的推薦教授親筆簽名，已通過博士資格考不需推薦人)

教授姓名: _____ 單位: _____

電話: _____ Email: _____

推薦教授簽名:

第一原理材料計算進階課程

2022 Summer School on First Principles Computational Materials Research - Advance Level

初階課程繳交作業的題目

1

1. Calculate the lattice constant by minimization of stress and energy of W and Ni.
2. Calculate the density of states and local density of states of W and Ni.
3. Calculate the band structure and partial band structure of W and Ni. We demo the results of Au (fcc) and Fe (bcc) in the example.

2

1. Calculate the surface Relaxation, surface relaxation, surface energy and work function for W(100) and Ni(100) surfaces using 1, 3 and 5 layers.
2. Calculate the bond length and binding energy of O₂ molecule. We demo the results of Co₂ in the example.

附上的範例以Au、Fe 與Co₂ 為例子呈現。
作業則要呈現W、Ni與O₂的計算結果。