

## **3. 请使用abinit程序，完成：**

- a) 使用提供的赝势文件，计算选定纯金属（可从Mg、Ti、Fe、Nb、Ni、Cu中择一）在 $T=0\text{K}$ 时的平衡点阵常数和基态能量，并对平面波截断动能 (ecut)和K格点 (ngkpt)做收敛性测试，并作图研究ecut和ngkpt如何影响计算结果。 (20分)
- b) 计算上题中金属在 $T=0\text{K}$ 时(100)晶面的表面能，并研究不同真空层数和原子层数对表面能计算结果的影响。 (20分)

要求随作业附abinit程序输入(.in和.files)及主输出(.out)文件，发送到邮箱  
[jbliu@mail.tsinghua.edu.cn](mailto:jbliu@mail.tsinghua.edu.cn)