



## 仿真实验2

# 计算模拟仿真实验

2025年4月10日

## ➤ 基础物理II 计算模拟仿真实验

### 实验目的:

通过第一性原理方法, 计算模拟硅晶体的电子能带结构及其态密度, 以加深对电子能带理论的理解。

### 实验要求:

1. 使用Materials Studio 8.0中的CASTEP模块或DMol3模块进行计算模拟。

(MS8.0及相关资料下载链接:

<https://pan.baidu.com/s/1zQ5qVycOEhFmpxZZTpTZWQ?pwd=m8m5> 提取码: m8m5)

2. 每人撰写实验报告一份 (电子版), 6月9日之前通过本班课代表提交。

## ➤ 基础物理II 计算模拟仿真实验

### 实验报告要求:

格式不限, 至少包含以下内容:

1. 个人信息 (姓名, 学号)
2. 实验步骤描述
3. 计算参数描述 (例: Functional, Pseudopotentials, Energy Cutoff 等)
4. 计算结果展示 (电子能带结构图, 电子态密度图, 费米能级位置, 带隙值)
5. 计算结果讨论 (例: 为什么硅是半导体? 计算结果与实验结果的对比)

## ➤ 基础物理II 计算模拟仿真实验

参考实验结果:

