

9月18日上机实习安排

1. 用GaussView或者Materials Studio软件画CuPc分子
2. FCC Fe晶体的建模
3. HCP Fe₅₃团簇的建模
4. 单层石墨烯@Ni(111)表面的建模

开始上课前20 min可以有**3名同学**（杨世隆(+20)、罗令衡(+20)、高新(+10)）针对作业进行**PPT展示**！

余下时间上机操作（同学、老师一起讨论操作），**4项作业自由选择完成**，下课前10 min告之完成情况

2.3 晶体和表面的建模

➤2.3.2 表面的建模: **graphene@Ni(111)**

Import crystal structures

Graphite

$$a = b = 2.460 \text{ \AA}, c = 6.8 \text{ \AA}$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

Ni(111) surface

$$a = b = 4.984 \text{ \AA}$$

$$\gamma = 120^\circ$$

FCC Ni

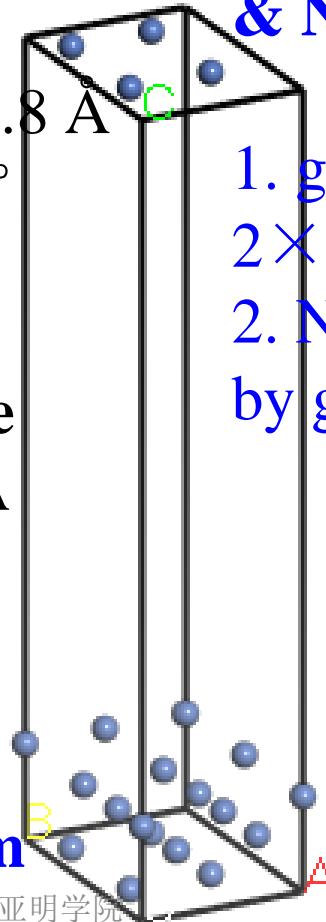
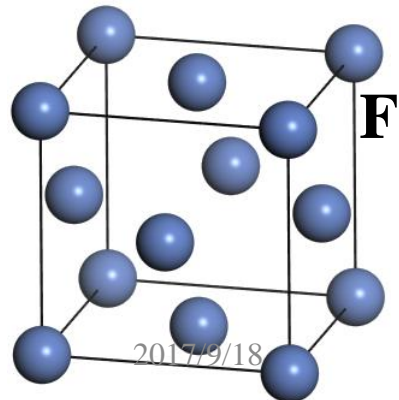
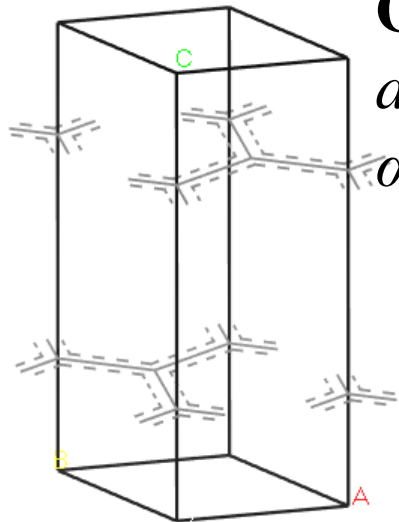
1. Cut Ni(111)

2. Add 30 \AA-vacuum layer

Match graphene layer & Ni(111) surface

1. graphene layer supercell 2×2

2. Ni(111) surface covered by graphene



2.3 晶体和表面的建模

➤ 2.3.3 团簇的建模: 参考晶体结构

