

۱- یک نانو مکعب از جنس نیکل Ni با ابعاد ضخامت و پهنا و طول ۳ شبکه فلزی را بر اساس چیدمان FCC بچینید پتانسیل بین ذرات فلزی را از نوع ساتن-چن فرض نمایید.

الف- نیروی وارد بر یکی از ۸ اتم گوشه را در سه راستا محاسبه و ذخیره نمایید. زمان لازم برای محاسبات چه مقدار است؟

ب- حال می خواهیم اثر شعاع قطع را روی دقت پاسخ و همچنین زمان محاسبات بررسی نماییم.

مقدار نیروی در راستای X وارد بر همان اتم قبلی را در نظر بگیرید. این نیرو را بر حسب شعاع قطع $r_{cut-off} = 6:1:18 \text{ \AA}$ ترسیم نمایید. همچنین زمان محاسبه این نیرو را نیز بر حسب شعاع قطع ترسیم نمایید. روی نتایج بحث کنید. شعاع قطع مناسب را پیشنهاد کنید.