1. 리눅스 사용할 수 있는 환경을 만드세요. 본인의 랩탑 컴퓨터에 Virtual box 를 설치하고 그 안에서 예를 들면 Ubuntu (리눅스의 한 종류) 를 설치하는 방법이 가장 편합니다. 전화기나 태블릿 등의 모바일 디바이스에 리눅스를 사용할 수 있는 환경을 만들어도 됩니다.

2. 리눅스에 quantum espresso 패키지를 설치하세요. http://www.quantum-espresso.org/ 참조.

3. Quantum espresso 에서 제공하는 예제 01 과 익숙해지세요. examples 폴더에 있는 example01 을 실행하고 pw.x 프로그램의 input file 에 있는 parameter 들의 의미를 대략 파악하고 정리하세요. http://www.quantum-espresso.org/wp-content/uploads/Doc/INPUT_PW.html 참조.

4. Total energy, lattice parameter, bond length, and bulk modulus of silicon. example01 의 Si 계산을 약간 변형하여 lattice parameter 를 바꿔가면서 total energy 를 계산해보고 (output file 에 total energy 가 나옵니다) Energy vs. lattice parameter 그래프로부터 (1) total energy 가 최소가 되는 lattice parameter 와 이에 해당하는 인접한 Si 원자들 사이의 거리를 찾고 알려진 값과 비교하고 (2) curvature 정보로부터 bulk modulus 를 GPa 단위로 계산해보고 알려진 값과 비교해보세요.

4. Electronic energy band structure. 우리는 양자 물리 시간에 Kronig-Penney model 을 공부하면서 가장 간단한 1 차원 밴드 구조를 배웠습니다. 우리는 3 차원 물질의 밴드 구조에 관심이 있지만 어차피 같은 이야기이니 Kronig-Penney model 을 어떻게 푸는지를 복습하세요. 그리고 Brillouin zone 이 무엇인지를 구글 서치 등을 통하여 공부하세요.

5. Electronic energy band structure of silicon. example01 의 Si 계산에서는 total energy 뿐만 아니라 전자의 에너지 밴드 구조도 얻을 수 있습니다. (1) Silicon 의 밴드 구조를 그림으로 그려보고, Brillouin zone 상에서 어떠한 k path 를 따라서 그린 밴드 구조인가를 설명하세요. (silicon 의 Brillouin zone 은 잘 알려져 있습니다.) (2) 어떠한 band 가 차 있는 밴드 (occupied band) 이고 어떤 밴드가 비어 있는 밴드 (empty band) 인지 표시해보세요. (3) Band gap 은 (band gap: 차 있는 상태 중에서 가장 높은 높은 energy 를 갖는 상태와 – valence band maximum – 비어 있는 상태 중에서 가장 낮은 energy 를 갖는 상태 – conduction band minimum – 의 에너지 값 차이. VBM 과 CBM 이 같은 k point 에 있을 필요는 없고 같은 k point 에 오는 물질을 특별히 direct gap material 이라 함) 얼마인가를 들여다보고 알려진 band gap 과 비교해보세요.

* 참고: Kohn-Sham energy eigenvalue 는 진짜 전자의 excitation energy 에 해당하지는 않으나 상당히 좋은 근사로 그렇다는 점이 알려져 있습니다. (대략적인 이유는 이유는 correlation 효과가 electron-ion interaction, Hartree, exchange 효과 등에 비해 작아서.) 그래서 사람들이 Kohn-Sham energy band structure 를 실험 결과와 직접 비교하는 일을 많이 합니다. Angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) 실험을 통해서 전자 밴드 구조를 직접 측정할 수 있습니다.

(뒷장에도 문제가 있습니다.)

6. Bond length and the frequency of vibration of a CO molecule. Pseudopotential library (http://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials/) 에 가서 Functional 은 PZ (일종의 LDA) 를 선택하고, Type 은 NORMCONS (norm-conserving) 을 선택하고, ANY PP LIBRARY 를 선택하고, other options 는 NON OR SCALAR RELATIVISTIC 을 선택하고 (C 나 O 는 가벼운 원소라서 상대론적 correction 을 할 필요가 없습니다) Apply Filter 버튼을 누르세요. 그리고서 C 원소를 클릭해서 C.pz-hgh.UPF 을 다운로드 받고, O 원소를 클릭해서 O.pz-hgh.UPF 을 다운로드 받아서 사용하세요. 4 번 문제를 해결한 경험을 바탕으로 적합한 input file 을 만들어서 pw.x 프로그램을 실행하세요. C 와 O 사이의 거리를 달리하면서 total energy 를 계산하여 그림으로 그려보고, 이 계산 결과로부터 CO 분자의 bond length 와 molecular vibration frequency 를 계산하세요. 계산한 값과 알려진 bond length 및 웹사이트 http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/molecule/vibspe.html 에 나와 있는 molecular vibration frequency 의 측정 값을 비교해보세요. 이 문제에서는 여러분이 직접 input file 을 만들고 이를 pw.x 프로그램을 이용해서 실행해보는 의미가 있습니다. (이전 문제에서는 만들어진 input file 을 약간만 변형하고 주어진 script 를 사용해서 실행했습니다.)

이 문제를 해결하는데 중요한 점 한 가지는 unit cell 을 어떻게 잡느냐 입니다. Quantum Espresso 는 crystal 문제를 푸는데 최적화 되어 있기 때문에 periodic boundary condition 을 사용합니다. 그래서 molecule 이나 nanostructure 를 연구하려면 반복되지 않는 방향으로는 unit cell 의 크기를 충분히 크게 해주어서 인접한 unit cell 사이의 원자들로부터 스며 나오는 전하밀도가 서로 겹치지 않고 인접한 unit cell 의 원자로 인한 퍼텐셜의 변화도 느끼지 않아야 합니다. (원자간의 거리가 8 angstrom 정도 되면 이러한 기준에서 충분히 멀다고 할 수 있습니다.) 이를 위해서 이 문제에서는 unit cell 을 길이가 8 A x 8 A x 16 A 인 직육면체로 설정합시다. 그리고 C 와 O 의 x, y 좌표는 같게 설정합시다. z 방향으로 한 unit cell 안에 있는 C 와 O 사이의 거리를 변화시키되 거리가 8 angstrom 보다 멀어지게 되면 (한 unit cell 안에 있는 C 와 O 말고) 인접한 unit cell 에 있는 원자와의 거리가 8 angstrom 보다 작아지므로 8 angstrom 까지만 계산을 해보세요.