

Quantum-Espresso

입력파일 작성방법

작성일자 : 20250128

작성자 : 안용상

입력 파일의 구성

Quantum Espresso의 입력 파일

Quantum ESPRESSO(QE)는 밀도범함수이론(DFT)을 기반으로 하는 전자 구조 계산 프로그램으로, 입력 파일을 통해 **물리적 시스템과 계산 방식을 정의**합니다. 본 매뉴얼에서는 pw.x를 사용한 SCF(Self-Consistent Field) 계산을 수행하기 위한 입력 파일 구성 요소를 설명하겠습니다.

Quantum Espresso 입력 파일의 기본 구성

기본적인 입력 파일 구조

```
&CONTROL  계산 유형, 출력 설정 등을 정의
...
/
&SYSTEM   격자, 전자구조, 퍼듀드-전위 등의
...       물리적 시스템 정의
/
&ELECTRONS 전자 상태 및 SCF수렴 조건 설정
...
/
&IONS     원자 위치 최적화 옵션 설정
...       (필요 시)
/
&CELL     셀 최적화 및 격자 조정 옵션 설정
...       (필요 시)
/
ATOMIC_SPECIES 원소 종류 &
...           퍼듀드-전위 파일 지정
ATOMIC_POSITIONS 원자의 좌표 정보
...
K_POINTS    k-point 샘플링 설정
...
CELL_PARAMETERS Lattice Vector 지정
...          (필요 시)
```

Namelist Block : & 기호로 시작하며, 계산에 필요한 주요 설정을 정의하는 블록

Data Block : 원자 정보 및 k-Points Grid 등의 정보를 정의하는 블록

용어 설명 - Pseudopotential (퍼듀드 전위)란?

퍼듀드 전위란?

퍼듀드 전위(Pseudopotential)는 전자를 단순화한 효과적인 전위 함수로, 주로 고체 물리학이나 계산 화학에서 사용된다. 원자핵과 전자 사이의 복잡한 상호작용을 효율적으로 계산하기 위해 만들어진 개념이다. 대부분의 화학적 성질에 큰 영향을 미치지 않는 내각 전자들은 계산에서 명시적으로 고려하지 않고 대신 내각 전자의 효과를 포함한 유효 전위로 대체하며, 화학 결합이나 물리적 성질을 결정하는 외각 전자들만 명시적으로 고려해 집중하게 하면서 상호작용을 단순화하며 계산의 정확성을 유지하게 한다. 일반적으로 평면파 기반 계산에 적합하도록 설계되었다.

퍼듀드 전위의 종류

초국소 전위 (Ultrasoft Pseudopotential)
Projector Augmented Wave (PAW) 등

퍼듀드 전위 이름의 유래

퍼듀드 전위라는 용어는 널리 사용되는 pseudopotential인 PBE pseudopotential에서 따왔다. Perdew-Burke-Ernerhof의 약자인 PBE의 Perdew를 따온 것으로 보이며, Pseudopotential을 지칭하는 말로 쓰인다.

퀀텀 에스프레소에서의 사용

퀀텀 에스프레소에서는 다양한 형태의 슈도 포텐셜 양식을 지원한다. 보통 .UPF 확장자로 제공되며, 계산에 필요한 원자들의 전위 정보를 포함한다.

요약

퍼듀드 전위는 복잡한 원자핵-전자 상호작용을 단순화하여 계산의 효율성을 높이기 위한 방법입니다. 퀀텀 에스프레소에서 이를 올바르게 설정하는 것은 정확한 계산을 위해 매우 중요합니다.

Namelist Block (1) - &CONTROL block

&Control Block (계산 제어)

퀀텀 에스프레소(Quantum ESPRESSO)의 &CONTROL 블록은 계산의 전반적인 제어 파라미터를 설정하는 곳이다. 이 블록은 입력 파일(*.in)의 첫 번째 섹션으로, 계산 유형, 출력 파일 설정, 데이터 저장 위치, 퍼듀드 전위 파일 경로 등 중요한 정보를 포함한다

```
&CONTROL
  calculation = 'scf',      ! 계산 유형 (scf, relax, vc-relax, bands 등)
  prefix = 'Si',           ! 출력 파일의 기본 이름
  outdir = './tmp/',       ! 중간 데이터 저장 위치
  pseudo_dir = './pseudo/' ! 퍼듀드-전위 파일 위치
  tprnfor = .true.         ! 원자 힘(force) 출력 여부
  tstress = .true.         ! 응력 텐서 출력 여부
  verbosity = 'high'       ! 출력 정보 수준 (low, medium, high)
/
```

1. calculation

- **역할:** 수행할 계산의 유형을 지정합니다.
- **옵션:**
 - 'scf' (Self-Consistent Field): 자기 일관성을 만족하는 상태를 계산합니다.
 - 'relax': 원자 위치를 최적화하여 시스템의 에너지를 최소화합니다.
 - 'vc-relax': 원자 위치와 셀 파라미터를 동시에 최적화합니다.
 - 'nscf': 비자기일관적 계산으로 밴드 구조를 계산합니다.
 - 'bands': 에너지 밴드 구조를 계산합니다.
 - 'md': 분자 동역학 시뮬레이션을 수행합니다.

2. prefix

- **역할:** 출력 파일 이름에 사용되는 접두사를 지정합니다.
- **설명:** 계산에 의해 생성된 중간 파일 및 출력 파일 이름을 구별하기 위해 사용됩니다. 예를 들어, 'Si'로 설정하면 출력 파일 이름이 Si.save, Si.wfc 등이 됩니다.

3. outdir

- **역할:** 중간 데이터(웨이브 함수, 중간 상태 등)가 저장될 디렉토리를 지정합니다.
- **기본값:** 계산이 진행 중인 현재 디렉토리.
- **설정 예시:**
 - ./tmp/: 현재 디렉토리의 하위 디렉토리 tmp에 저장.
- **팁:** 디스크 I/O를 줄이기 위해 RAM 디스크(/dev/shm 등)를 설정하기도 합니다.

4. pseudo_dir

- **역할:** 퍼듀드 전위(pseudopotential) 파일이 저장된 디렉토리를 지정합니다.
- **설정 예시:**
 - ./pseudo/: 현재 디렉토리의 pseudo 하위 폴더에서 퍼듀드 전위를 찾습니다.
- **팁:** 퍼듀드 전위 파일은 계산 정확도에 중요한 역할을 하므로 올바른 디렉토리와 파일을 지정해야 합니다.

5. tprnfor

- **역할:** 계산 중 원자 힘(force) 출력 여부를 설정합니다.
- **값:**
 - .true.: 원자별 힘 정보를 출력합니다.
 - .false.: 힘 정보를 출력하지 않습니다.
- **용도:** 구조 최적화(relax, vc-relax) 계산에서 원자 힘의 변화 추적에 유용합니다.

6. tstress

- **역할:** 응력 텐서(stress tensor) 출력 여부를 설정합니다.
- **값:**
 - .true.: 응력 텐서를 출력합니다.
 - .false.: 응력 텐서를 출력하지 않습니다.
- **용도:** 셀 최적화(vc-relax) 계산에서 중요합니다.

7. verbosity

- **역할:** 출력 정보의 상세 수준을 설정합니다.
- **옵션:**
 - 'low': 최소한의 정보만 출력합니다.
 - 'medium': 표준 정보를 출력합니다.
 - 'high': 상세한 정보를 출력합니다.
- **팁:** 초기 디버깅 단계에서는 'high'를 사용하고, 이후 안정적인 계산에서는 'medium' 또는 'low'를 사용하는 것이 좋습니다.

추가적으로 사용할 수 있는 키워드

1. **restart_mode**
 - **역할:** 중단된 계산을 이어서 할지 설정.
 - **옵션:**
 - 'from_scratch': 처음부터 계산을 시작합니다.
 - 'restart': 이전 계산 데이터를 사용하여 이어서 계산합니다.
2. **wf_collect**
 - **역할:** 모든 프로세스에서 생성된 웨이브 함수를 하나의 파일에 수집합니다.
 - **값:**
 - .true.: 웨이브 함수 파일을 하나로 통합.
 - .false.: 프로세스별로 웨이브 함수 파일이 분리됨.
 - **용도:** 후속 계산(nscf, bands 등)에서 유용.
3. **disk_io**
 - **역할:** 디스크 입출력(I/O) 동작 방식을 제어합니다.
 - **옵션:**
 - 'default': 표준 I/O 사용.
 - 'minimal': I/O를 최소화.
 - 'none': 디스크에 데이터 저장을 생략.
4. **etot_conv_thr**
 - **역할:** 총 에너지 수렴 기준(threshold)을 설정합니다.
 - **단위:** Ry.
 - **예시:**
 - 1.00-4: 총 에너지 변화가 이 값보다 작아지면 계산을 종료.
5. **forc_conv_thr**
 - **역할:** 힘의 수렴 기준을 설정합니다.
 - **단위:** Ry/Bohr.
 - **예시:**
 - 1.00-3: 원자 힘이 이 값보다 작아지면 계산을 종료.

Namelist Block (2) - &SYSTEM block

SYSTEM block (물리적 시스템 정의)

&SYSTEM 블록은 쿼텀 에스프레소에서 계산할 시스템의 물리적 및 계산적 매개변수를 설정하는 부분이다. 이 섹션에서는 격자 구조, 원자 수, 컷오프 에너지 등 시스템 정의와 관련된 정보를 지정한다.

```
&SYSTEM
 ibrav = 2,          ! 격자 구조 (2: FCC)
  celldm(1) = 10.2,  ! 격자 상수 (Bohr 단위)
  nat = 2,           ! 원자의 개수
  ntyp = 1,          ! 원소의 종류 개수
  ecutwfc = 50.0,    ! 파동함수 컷오프 에너지 (Ry)
  ecutrho = 200.0,   ! 전하 밀도 컷오프 (Ry)
  occupations = 'smearing'
  smearing = 'gaussian'
  degauss = 0.02
/
```

1. ibrav

- 역할:** 격자의 브라베(BRAVAIS) 구조를 지정합니다.
- 값:** 정수 값으로 격자 유형을 설정합니다.
 - 0: 자유 격자(직접 격자 벡터 입력 필요)
 - 1: 단순 입방체(SC)
 - 2: 면심 입방체(FCC)
 - 3: 체심 입방체(BCC)
 - 4~14: 다른 결정 구조들 (예: 사방정계, 삼방정계 등)
- 예시:**
 - ibrav = 2 는 면심 입방체(FCC) 구조를 의미합니다.
- 참:** ibrav = 0 인 경우, 격자 벡터를 수동으로 정의해야 합니다(CELL_PARAMETERS 블록 사용).

2. celldm(1)

- 역할:** 격자 상수(격자 크기)를 설정합니다.
- 단위:** 보어 반지름(Bohr, 1 Bohr ≈ 0.529 Ångström).
- 설명:** celldm(1) 은 FCC 또는 BCC 구조에서 격자의 기본 길이를 정의합니다.
 - 예: celldm(1) = 10.2 는 격자 상수가 10.2 보어(약 5.4 Å)임을 의미합니다.
- 참:** 브라베 구조에 따라 추가적인 격자 파라미터(celldm(2), celldm(3) 등)를 설정할 수도 있습니다.

3. nat

- 역할:** 계산에 포함된 원자의 총 개수를 지정합니다.
- 설명:** 입력 파일의 ATOMIC_POSITIONS 블록에서 정의된 원자의 총 개수와 일치해야 합니다.
 - 예: nat = 2 는 원자가 두 개임을 의미합니다.

4. ntyp

- 역할:** 시스템에서 사용되는 원소의 종류 수를 지정합니다.
- 설명:** 서로 다른 원소의 개수를 나타냅니다.
 - 예: ntyp = 1 은 시스템에 하나의 원소(예: Si)만 포함된다는 의미입니다.
- 참:** 각 원소의 퍼듀드 전위 파일은 ATOMIC_SPECIES 블록에서 정의해야 합니다.

5. ecutwfc

- 역할:** 파동 함수(Wavefunction)의 평면파 컷오프 에너지를 지정합니다.
- 단위:** 라이드버그(Ry, 1 Ry ≈ 13.6 eV).
- 설명:**
 - 평면파로 전자를 표현할 때, 에너지 컷오프 값은 사용할 평면파의 최대 에너지를 정의합니다.
 - ecutwfc = 50.0 은 파동 함수에 대해 50 Ry까지의 에너지를 가진 평면파를 포함한다는 의미입니다.
- 참:** 컷오프 에너지가 너무 낮으면 계산 정확도가 떨어지고, 너무 높으면 계산 시간이 증가합니다.

6. ecutrho

- 역할:** 전하 밀도(Charge Density)의 컷오프 에너지를 설정합니다.
- 단위:** 라이드버그(Ry).
- 설명:**
 - 전하 밀도는 보통 파동 함수보다 더 높은 에너지 컷오프가 필요합니다.
 - 일반적으로 ecutrho 는 ecutwfc 의 4~8배로 설정됩니다.
 - 예: ecutrho = 200.0 은 200 Ry까지의 에너지를 가진 평면파를 포함한다는 의미입니다.
- 참:** ecutrho 값을 너무 낮게 설정하면 전하 밀도 계산이 부정확해질 수 있습니다.

7. occupations

- 역할:** 전자 점유 상태를 설정합니다.
- 옵션:**
 - 'fixed': 고정된 전자 점유 상태.
 - 'smearing': 점유 상태를 스미어링 기법으로 처리.
 - 'tetrahedra': 테트라헤드럴 방식 사용(밴드 갭이 없는 금속에는 잘 맞지 않음).
- 예시:** occupations = 'smearing' 은 금속성 물질이나 열적 활성 상태를 계산할 때 사용됩니다.



8. smearing

- 역할:** 스미어링 기법의 유형을 설정합니다.
- 옵션:**
 - 'gaussian': 가우시안 함수 스미어링.
 - 'methfessel-paxton': 메트펠셀-팩스톤 방식.
 - 'marzari-vanderbilt': 페르미-디랙 분포 스미어링.
- 예시:** smearing = 'gaussian' 은 가우시안 스미어링 방식을 사용한다는 뜻입니다.

9. degauss

- 역할:** 스미어링 폭(전자 온도)을 설정합니다.
- 단위:** 라이드버그(Ry).
- 설명:**
 - degauss 는 전자의 점유 상태를 결정하는 데 사용됩니다.
 - 예: degauss = 0.02 는 스미어링 폭이 0.02 Ry임을 의미합니다.
- 참:** 스미어링 폭이 너무 크면 정확도가 떨어질 수 있으며, 너무 작으면 계산이 수렴하지 않을 수 있습니다.

Namelist Block (3) - &ELECTRON block

ELECTRON block

&ELECTRONS 블록은 전자 구조 계산의 수렴 조건과 알고리즘을 설정하는 섹션. 이는 쿼텀 에스프레소에서 자기 일관 필드(SCF, Self-Consistent Field) 계산의 정확도와 속도에 중요한 역할을 한다.

```
&ELECTRONS
  conv_thr = 1.0d-6,      ! SCF 에너지 변화량이 10-6 Ry 이하가 되면 수렴
  mixing_beta = 0.7,      ! 새로운 전하 밀도의 70%만 기존 밀도와 혼합
  diagonalization = 'david' ! Davidson 반복법을 사용하여 행렬 대각화
  electron_maxstep = 100 ! 최대 100번 SCF 반복 수행
/
```

1. conv_thr (SCF 수렴 기준)

- 역할: SCF 계산의 총 에너지 수렴 기준을 설정합니다.
- 단위: 라이딩버그(Ry).
- 설명:
 - SCF 계산에서는 전자의 밀도 및 에너지가 반복적으로 업데이트됩니다.
 - 이 과정에서 에너지 변화량이 `conv_thr` 값보다 작아지면 수렴했다고 판단하고 SCF 계산을 종료합니다.

예시:

```
fortran
conv_thr = 1.0d-6
```

- 총 에너지가 10^{-6} Ry 이하로 변하면 SCF 계산을 종료합니다.
- 팁:
 - 높은 정밀도가 필요하면 `1.0d-8` 또는 그 이하로 설정.
 - 빠른 계산이 필요하면 `1.0d-5` 또는 `1.0d-6` 사용.
 - 일반적인 DFT 계산에서는 `1.0d-6 ~ 1.0d-8` 이 적절합니다.

2. mixing_beta (전하 밀도 혼합 파라미터)

- 역할: SCF 과정에서 전하 밀도의 업데이트 양을 조절합니다.
- 값의 범위: $0 < \text{mixing_beta} < 1$
- 설명:
 - SCF 계산은 반복 과정에서 전자 밀도를 조정하면서 수렴을 유도합니다.
 - `mixing_beta` 는 새로운 밀도를 기존 밀도와 혼합하는 비율을 결정합니다.
 - 너무 낮으면 SCF 수렴 속도가 느려지고, 너무 높으면 발산할 수도 있습니다.

예시:

```
fortran
mixing_beta = 0.7
```

- 새로운 전자 밀도의 70% 만을 기존 밀도와 혼합하여 업데이트.
- 팁:
 - 금속의 경우: SCF 수렴이 어려울 수 있으므로 `0.1 ~ 0.4` 정도로 설정.
 - 절연체의 경우: SCF가 잘 수렴하므로 `0.5 ~ 0.8` 사용 가능.
 - 만약 SCF가 수렴하지 않는다면 `0.3` 정도로 낮춰보는 것이 좋습니다.

(.l.)

3. diagonalization (행렬 대각화 방법)

- 역할: 해밀토니안 행렬을 대각화하는 방법을 설정합니다.
- 옵션:
 - `'david'`: Davidson 반복법 (기본값, 대부분의 경우 적합)
 - `'cg'`: 공액 기울기법(Conjugate Gradient)
 - `'paral_david'`: 병렬 Davidson 반복법 (병렬 연산 최적화)
 - `'rmm-davidson'`: RMM-DIIS 방법 (보다 빠른 수렴 가능)

예시:

```
fortran
diagonalization = 'david'
```

- Davidson 반복법을 사용하여 행렬을 대각화.
- 팁:
 - 기본적으로 `'david'` 가 가장 안정적이고 효율적입니다.
 - 큰 시스템이나 병렬 계산에서는 `'paral_david'` 사용 가능.
 - SCF 수렴이 어렵다면 `'rmm-davidson'` 을 실험적으로 사용.

4. electron_maxstep (SCF 최대 반복 횟수)

- 역할: SCF 계산에서 전자 밀도 업데이트를 최대 몇 번 반복할지 설정.
- 설명:
 - SCF 계산은 반복 과정을 통해 전자 밀도를 최적화합니다.
 - 수렴이 되지 않으면 최대 반복 횟수(`electron_maxstep`) 이후에 계산이 종료됩니다.

예시:

```
fortran
electron_maxstep = 100
```

- SCF 계산을 최대 100번 반복한 후, 수렴 여부에 관계없이 종료.
- 팁:
 - 대부분의 시스템은 50~100번 반복 내에 수렴함.
 - 금속 같은 경우 수렴이 어려울 수 있으므로 200~300으로 설정할 수도 있음.
 - 만약 수렴하지 않는다면 `mixing_beta` 값을 낮추고 `conv_thr` 값을 조금 높이는 것도 방법.

Data Block

Data block

퀀텀 에스프레소의 입력 파일에서 **데이터 블록**은 계산할 원소, 원자의 위치, k-점 샘플링 등을 설정하는 중요한 섹션

4.1 ATOMIC_SPECIES 블록 (원소 및 퍼듀드 전위 지정)

```
fortran

ATOMIC_SPECIES
Si 28.0855 Si.pbe-n-rrkjus_psl.1.0.0.UPF
```

설명

- 역할: 원소의 종류와 그에 해당하는 퍼듀드 전위(Pseudopotential)를 지정합니다.
- 각 항목의 의미:
 - `Si`: 원소 기호 (실리콘)
 - `28.0855`: 원자의 질량 (단위: 원자 질량 단위, amu)
 - `Si.pbe-n-rrkjus_psl.1.0.0.UPF`: 실리콘 원자의 퍼듀드 전위 파일(Pseudopotential File)

추가 설명

- 퍼듀드 전위 파일 (`.UPF`):
 - 전자-원자핵 간의 상호작용을 단순화한 파일.
 - `PBE` 는 **Perdew-Burke-Ernzerhof** 교환-상관 함수(GGA) 기반의 퍼듀드 전위를 의미함.
 - `rrkjus` 는 **Rappe-Rabe-Kaxiras-Joannopoulos** Ultrasoft (RRKJUS) 전위를 의미.
 - `psl` 은 **PseudoDojo**에서 제공하는 전위 라이브러리.

팁

- `.UPF` 파일은 `pseudo_dir` 에서 지정한 디렉토리에 있어야 합니다.
- 정확한 퍼듀드 전위를 선택하는 것이 계산의 정확도에 영향을 미칩니다.

4.2 ATOMIC_POSITIONS 블록 (원자 좌표 지정)

```
fortran

ATOMIC_POSITIONS {alat}
Si 0.00 0.00 0.00
Si 0.25 0.25 0.25
```

설명

- 역할: 원자의 위치(좌표)를 정의합니다.
- `{alat}`:
 - `{alat}` 는 좌표가 격자 상수(`celldm(1)`)의 배수로 주어진다는 의미입니다.
 - 즉, 좌표 (`0.25, 0.25, 0.25`) 는 격자 상수(`celldm(1)`)의 $1/4$ 지점을 의미합니다.

각 원자의 좌표 해석

- `Si 0.00 0.00 0.00` → 첫 번째 실리콘 원자는 격자의 원점(0, 0, 0)에 위치.
- `Si 0.25 0.25 0.25` → 두 번째 실리콘 원자는 격자의 ($\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) 위치에 존재.
- 이는 **다이아몬드 구조(FCC 격자에 2개의 원자가 있는 구조)**에 해당합니다.

팁

- `{alat}` 대신 `{bohr}` 또는 `{angstrom}` 을 사용할 수도 있음.
 - `{bohr}`: 좌표가 **보어(Bohr)** 단위로 주어짐.
 - `{angstrom}`: 좌표가 **앙스트롬(Å)** 단위로 주어짐.

4.3 K_POINTS 블록 (k-점 샘플링 설정)

```
fortran

K_POINTS automatic
6 6 6 1 1 1
```

설명

- 역할: `k-점 샘플링` 을 자동으로 설정하여 브릴루앙 존(BZ)에서 전자 구조 계산의 정밀도를 조절합니다.
- `automatic`:
 - 자동으로 균등한 k-점 그리드를 생성하는 방식.

각 숫자의 의미

값	설명
6 6 6	브릴루앙 존에서 k-점 격자 크기 ($6 \times 6 \times 6$)
1 1 1	k-점 오프셋 (0이면 감마 중심, 1이면 자동 이동)

- $6 \times 6 \times 6$ k-점 격자는 비교적 높은 정밀도를 제공하며, 이는 FCC 구조에서 일반적으로 사용됩니다.
- `1 1 1` 을 사용하면 자동으로 k-점이 조금 이동되어, 특정한 대칭성을 피하고 샘플링 정확도를 향상시킵니다.

팁

- 금속 시스템은 일반적으로 더 높은 k-점 밀도가 필요 ($8 \times 8 \times 8$ 또는 더 높은 값).
- 작은 단위 셀에서는 $4 \times 4 \times 4$ 정도로 설정해도 충분함.
- `Gamma-centered` 설정을 사용하려면 `0 0 0` 을 지정하면 됨.

참고 자료

gpt