**Quantum Espresso & VESTA 결정구조 다루기**

본 실습은 Zn구조와 H2O물분자를 대상으로한다.

**1 : 필요한 분자나 결정의 구조를 다운받자**

가장먼저 Zn결정구조를 다운로드 받자.   
<https://next-gen.materialsproject.org/materials/mp-79> 에 들어간뒤 로그인을 하면 Zn구조를 인터렉티브하게 볼 수 있고 여러 확장자로 구조파일을 다운로드 받을 수 있다. Materials Project는 ~~이며 ~~검증된 구조파일 데이터베이스이다??

텍스트, 스크린샷, 번호, 폰트이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

유닛셀 등의 정보가 기본적으로 저장되어있는 것을 확인할 수 있다.

스크린샷, 텍스트, 도표, 디자인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.텍스트, 스크린샷이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

여기서 CIF확장자로 파일을 다운로드 받자. 이제 H2O분자를 다운받자  
[https://www.chemspider.com/Chemical-Structure.937.html 에서 .mol](https://www.chemspider.com/Chemical-Structure.937.html%20에서%20.mol)파일을 다운받으면된다.

텍스트, 스크린샷, 폰트, 소프트웨어이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

이후 아보가드로 프로그램에서 이를 연다

스크린샷, 소프트웨어, 공, 멀티미디어 소프트웨어이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

Auto Optimization Tool을 통해 힘장 기반 구조최적화를 진행하자.

**2 : Zn결정의 필요한 평면들의 유닛셀을 행렬변환을 통해 만들어보자.**

먼저 기본적으로 다운받은 Plane은 001Plane일 가능성이 높지만 정확하게 확인해봐야한다. VESTA로 이를 열어 확인할 수 있다.구조파일을 열면 다음과 같다.

스크린샷, 구체, 원이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

이후 Edit > Lattice Plane > New > 001수정 후 001 Lattice Plane이 Z축과 수직인지 확인하자.

스크린샷, 구체, 원이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

그림에서 주황색 평면이 001방향벡터에 수직한 평면이며, 초록색은 101이다. 주황색 평면과 C축이 수직하는 것으로 보아 이 유닛셀의 Plane방향이 001이라는 것이 확정되었다.

Zn 표면에는 101 Plane이 존재한다. 이것이 맞는지 먼저 확인해보자.  
Boundary > Range를 xyz모두 4이상씩 맞춰주고 Apply해보자.

텍스트, 스크린샷, 폰트, 디자인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

101 Plane을 그려보면 다음과 같으며 상응하는 Plane이 있음을 확인했다.

스크린샷, 도표, 디자인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

이제 기존 001 Plane 유닛셀의 단위벡터들을 선형변환해서 원하는 101 Plane Unit Cell으로 만들어볼것이다. 선형변환에 대해 잘 모른다면 선형대수를 학습해서 공간을 선형적으로 변환해 원하는 형태를 만든다는 것이 어떤것인지 배워야한다. 방법은 다음과 같이 먼저 매트릭스를 구해야한다.

텍스트, 폰트, 친필, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

이를 만족하는 P의 해중에 하나를 구해보자. 라인, 도표, 폰트, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

P를 구했으므로 Transform버튼을 누르고 매트릭스 변환을 적용하자. <https://www.youtube.com/watch?v=vd13VDgbV_s&t=360s>

선형 변환을 위해 VESTA의 메뉴 Edit > Unit Cell > Transform버튼을 누르자. 그리고 이제 원하는 Plane 인덱스로 변환할 수 있는 매트릭스를 입력하자. 텍스트, 스크린샷, 소프트웨어, 디스플레이이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.  
경고가 나오면 Yes를 누르고 Search atoms in the new unit-cell and add them as new sites를 누르며 Apply하자 텍스트, 스크린샷, 폰트, 디자인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.  
그러면 다음과 같이 101 Plane이 기존과 달리 xy평면과 평행한 UnitCell이 얻어진다.

이와 같이 선형변환이 잘 적용되는 것을 확인했으므로, 기존 001 Plane Primitive Cell구조파일(Boundary늘리기전)에 이를 다시 적용해 101 Primitive Cell을 구하자. 스크린샷, 원, 공, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.이와 같이 구할 수 있다. 이제 이를 101Plane으로써 파일로 저장하고 추후에 이를 이용하면 된다.

3 : Primitive Cell을 반복시켜 결정 표면 만들기  
그림, 스케치, 도표, 만화 영화이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

다음과 같이 원하는 크기의 결정 표면을 만들자. 보통 표면을 연구할 때, 원자 층은 4~6층으로 설정하며, 진공크기는 14~16A정도로 설정한다. 위 케이스에서는 적절한 층당 원자개수를 8개로 설정하였으며 이를 수행하기 위해 Matrix Transform을 사용해 2x4x2 Primitive 반복셀을 만들어 새로운 유닛셀로 정의했다. <https://engineering-cluster.tistory.com/17>   
이후 이를 Zn\_101\_2x4x2\_primitive.vasp파일로 저장했다.  
이후 진공층을 추가해야하는데, 다음의 단계를 따라오길 바란다. 먼저 저장한 vasp파일을 텍스트 편집기로 연다. 텍스트, 스크린샷이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

다음과 같이 결정의 원자 좌표 및 유닛셀 벡터에 대한 정의가 있다. 여기서 c축에 대한 유닛셀 벡터의 z성분에 원하는 진공층 크기만큼 더해 숫자를 바꾸자. 텍스트, 스크린샷, 폰트, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.이때 c축의 z성분만 독단적으로 크기를 키우면 xy평면과 c축간의 angle이 바뀌게 되어 Unitcell이 왜곡된다. 따라서 유닛셀을 따라 c방향으로 진공층이 자연스럽게 추가될 수 있도록, a,b벡터에도 적절한 스케일링이 필요하다. 기존 c벡터의 z성분에서 업데이트된 z성분의 크기의 비율을 먼저 구하자. 여기서는 18.1066175707 / 4.10066176707일것이다. 이 스케일링 팩터를 a와 b벡터의 z성분에 곱해주면 끝이다.

텍스트, 폰트, 스크린샷, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.텍스트, 폰트, 스크린샷, 번호이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.  
좌측은 진공층을 추가하고의 Unitcell Vector각도고 우측은 추가하기전이다. 각도가 똑 같은 것을 볼 수 있으며, 스케일링 팩터를 통해 적절히 진공층을 추가함을 알 수 있다.

**4: 흡착 분자 추가하기**

흡착 분자를 추가하는 방법은 조금 복잡하다. Avogadro프로그램과 VESTA프로그램 및 텍스트 편집기가 필요하다. VESTA보다 분자를 추가해 적절한 위치에 옮기기가 Avogadro가 더 편하다. 따라서, 먼저 vasp파일을 Avogadro가 읽을 수 있는 xyz파일로 변환한 뒤, Avogadro를 통해 열어 결정구조 위에 적절한 위치에 분자를 위치시다. 이후 xyz로 변환한다. 이때 coordinate값을 복사해 기존 vasp파일의 coordinate부분에 텍스트 편집기로 붙혀넣어주면 끝이다. 스크린샷, 텍스트, 소프트웨어, 멀티미디어 소프트웨어이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.이와 같이 아보가드로에서 적절한 위치에 위치시킨 뒤, Coordination을 뽑아낸다. 그리고 .vasp파일에 붙혀넣고 원자 컬럼을 삭제한다. 이후 상단에 원자 종류별 개수 정보에 O와 H를 기입하고 개수를 써준다. 텍스트, 스크린샷, 폰트, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

그리고 VESTA에서 열어보면.. 스크린샷, 도표, 라인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.잘 적용이 된 것을 볼 수 있다.

안테나, 라인, 디자인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

DFT는 주기적 경계 조건(Periodic Boundary Condition, PBC)을 적용하여 계산되므로, 동일한 유닛셀이 반복적으로 배열된다. 따라서, 이번 Zn(101)처럼 C축이 XY 평면과 거의 평행하게 기울어진 형태라 하더라도, 인접한 유닛셀의 레이어와 자연스럽게 겹쳐 상호작용하므로 문제될 것이 없다.

**Zn 002 Plane만드는 과정중 이슈**

HCP 구조의 (001) 평면을 기반으로 유닛셀을 반복시키자 정상적인 HCP 구조가 형성되었다. 이후, (002) 평면을 생성하기 위해 행렬 변환을 적용하였고,

텍스트, 폰트, 화이트, 디자인이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

변환된 유닛셀을 반복시킨 결과 HCP 구조가 아니라 층이 겹겹이 쌓이는 형태가 나타났다. 이는 기존의 HCP 구조에서 한 단면이 교차로 반복되는 것이 아니라, 왜곡된 구조로 변형되었음을 의미한다.

스케치, 원, 디자인, 예술이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

스케치, 그림, 원, 도표이(가) 표시된 사진

AI가 생성한 콘텐츠는 부정확할 수 있습니다.

따라서, (002) 평면을 생성하는 방법으로 기존 (001) 평면을 계속 활용하는 방식을 택하였다. HCP 구조에서는 기본적으로 세 층이 반복되며, 가운데 위치한 층도 다른 층과 동일한 구조를 가지므로 별도의 변환 없이도 (002) 평면을 형성할 수 있기 때문이다.

이 과정에서 기존 유닛셀에서 더 작은 변환 행렬을 적용하면 구조가 왜곡될 수 있다는 점을 확인했다. 특히, 특정 축 방향으로 크기가 줄어드는 변환은 원자의 상대적 위치를 변경시켜 HCP 구조의 대칭성과 주기성을 유지하지 못할 가능성이 있다. 이를 통해, (002) 평면과 같은 특정 평면을 생성할 때는 단순한 행렬 변환보다 구조의 본질적인 반복성을 고려하는 것이 중요하다는 점을 알게 되었다.