

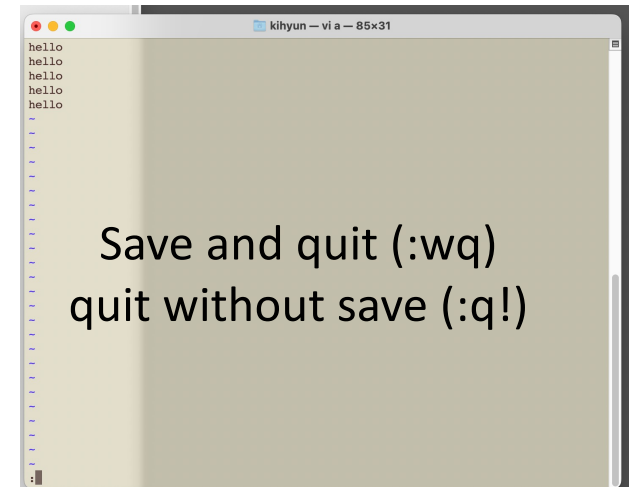
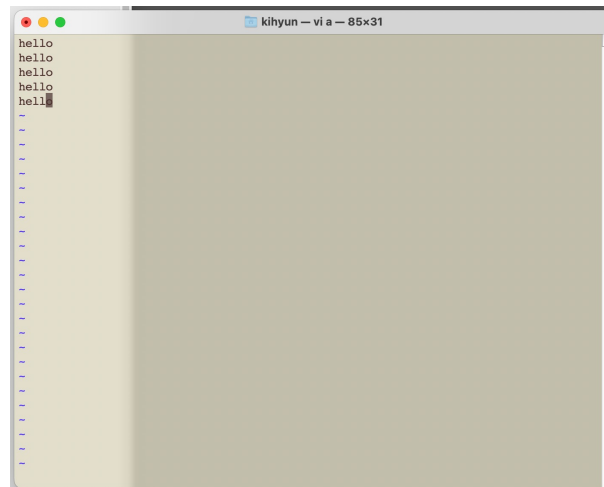
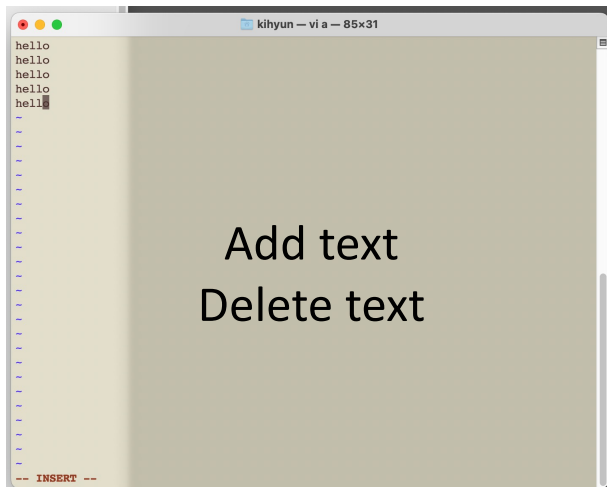


# 반도체소재설계 강의자료 02

한밭대학교 신소재공학과 신기현

# 리눅스 명령어 (맥의 터미널, 윈도우 파워셸 유사하게 작동)

- vi editor = text editor
- vi = **v**iewer
- Basic command : **vi [textfile]**
- If there is no file, will make file (열 파일이 없으면 생성)
- If there is file, will open file (열 파일이 있으면 오픈)



Three different modes

# 리눅스 명령어 (맥의 터미널, 윈도우 파워셸 유사하게 작동)

- / : means directories
- ./ : present directories
- ../ : previous (one above) directories
- ~/ : home directories
- pwd = present working directory (현재위치)
- ls = list = showing the files and directories
  - ls (./)
  - ls ../
  - ls (./)[name\_of\_directory]/
- mkdir = make directory
  - mkdir (./)[name\_of\_directory]
  - mkdir ../[name\_of\_directory]
  - mkdir ../../[name\_of\_directory]
- cd = change directory
  - cd [name\_of\_directory]
  - cd ~/something/something/something/[name\_of\_directory]
- Linux doesn't allow 'space' (띄어쓰기 X)
- Try to use 'tab' all the time (자동완성)
- 윗 화살표 (↑) : 직전사용한 명령어

기본적으로

‘[명령어] [주소]/[타겟]’ 의 형태

ex) cd ./test

ex) cd ~/something/something/test

ex) mkdir test

ex) mkdir ./test

ex) mkdir ~/something/something/test

ex) cp ~/d/d/d/text ~/d/e/f/g



# 리눅스 명령어 (맥의 터미널, 윈도우 파워셸 유사하게 작동)

- rmdir = remove directory (**only empty directory**)
  - rmdir [name\_of\_directory]
  - rmdir ../[name\_of\_directory]
- rm = remove files (**only files**)
  - rm [name\_of\_files]
  - **rm -rf [name\_of\_directory] : enforce the command**
- cp = copy files (or directory) to other directory
  - cp [name\_of\_files] ../[name\_of\_directory]
  - cp test.txt example.txt : **make new file or overwrite (복사 - 붙이기)**
  - cp ../[name\_of\_files] ../[name\_of\_directory]
- mv = move files(or directory) to other directory (**오려두기 - 붙이기**)
  - Same as cp



# ASE 설치

```
Last login: Mon Sep 23 18:36:22 on ttys000

The default interactive shell is now zsh.
To update your account to use zsh, please run `chsh -s /bin/zsh`.
For more details, please visit https://support.apple.com/kb/HT208050.
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$ pip install ase enter
```

명령어 (파이썬 패키지 인스톨)



**pip install ase**

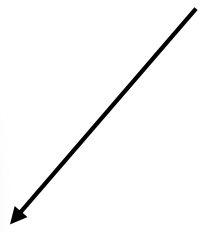
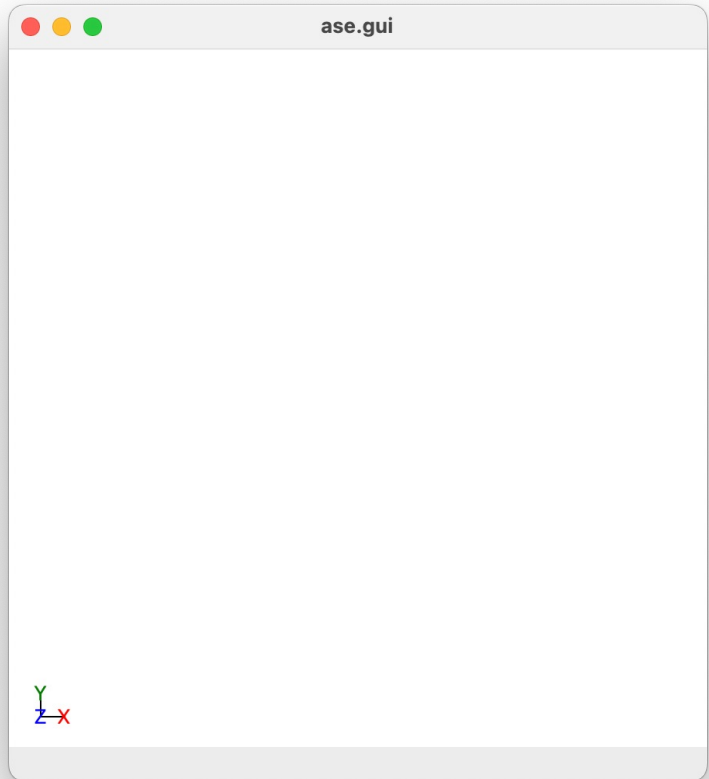
무엇을  
(패키지 이름)



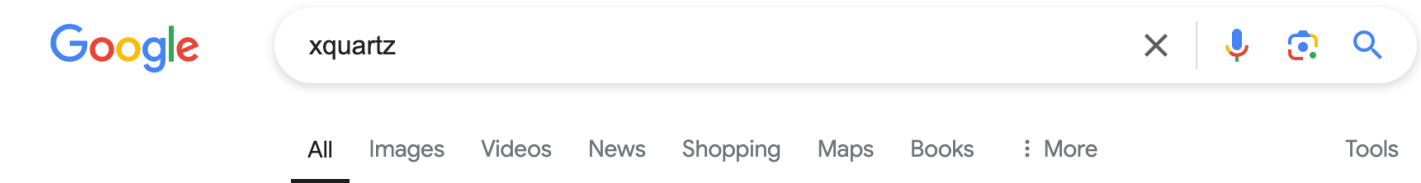
명령어 (install, uninstall, list ...)

# ASE 설치

```
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$  
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$  
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$  
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$ ase gui  
enter
```



# Xquartz 설치 (윈도우는 Xming)



XQuartz  
https://www.xquartz.org

## XQuartz

The XQuartz project is an open-source effort to develop a version of the X.Org X Window System that runs on macOS. Together with supporting libraries and ...

### XQuartz 2.8.5

Installation. Download XQuartz-2.8.5.pkg, and open it in macOS's ...



The XQuartz project is an open-source effort to develop a version of the X.Org X Window System that runs on macOS. Together with supporting libraries and applications, it forms the X11.app that Apple shipped with OS X versions 10.5 through 10.7.

### Quick Download

Download	Version	Released	Info
<a href="#">XQuartz-2.8.5.pkg</a>	2.8.5	2023-01-26	For macOS 10.9 or later

### License Info

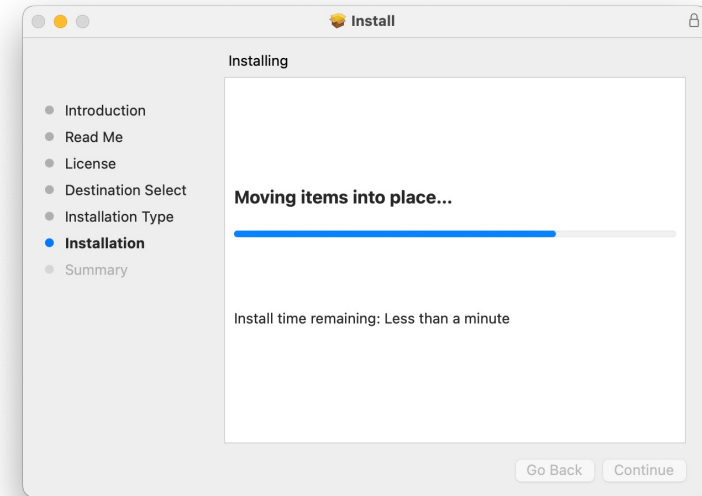
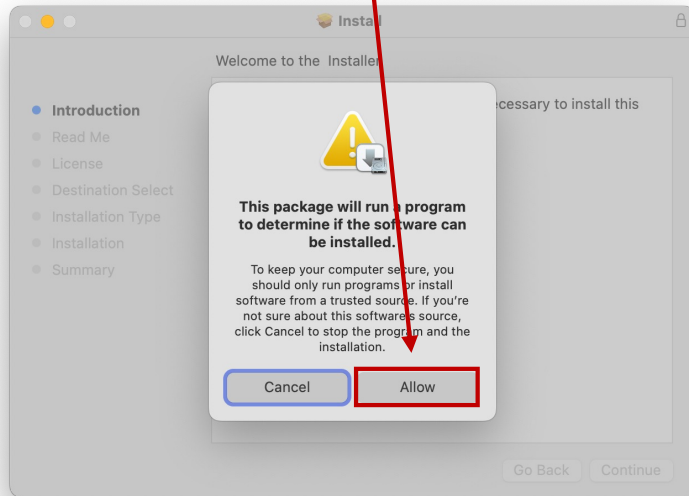
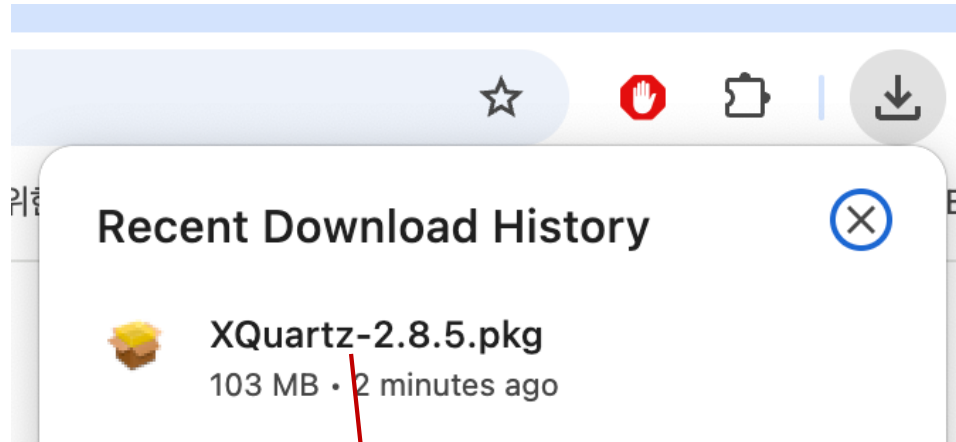
An XQuartz installation consists of many individual pieces of software which have various licenses. The X.Org software components' licenses are discussed on the X.Org Foundation Licenses page. The quartz-wm window manager included with the XQuartz distribution uses the Apple Public Source License Version 2.

Web site based on a design by Kyle J. McKay for the XQuartz project.  
Web site content distribution services provided by CloudFlare.

- Home
- Releases
- Support
- Contributing
- Bug Reporting
- GitHub



# Xquartz 설치

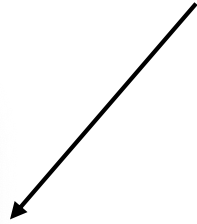
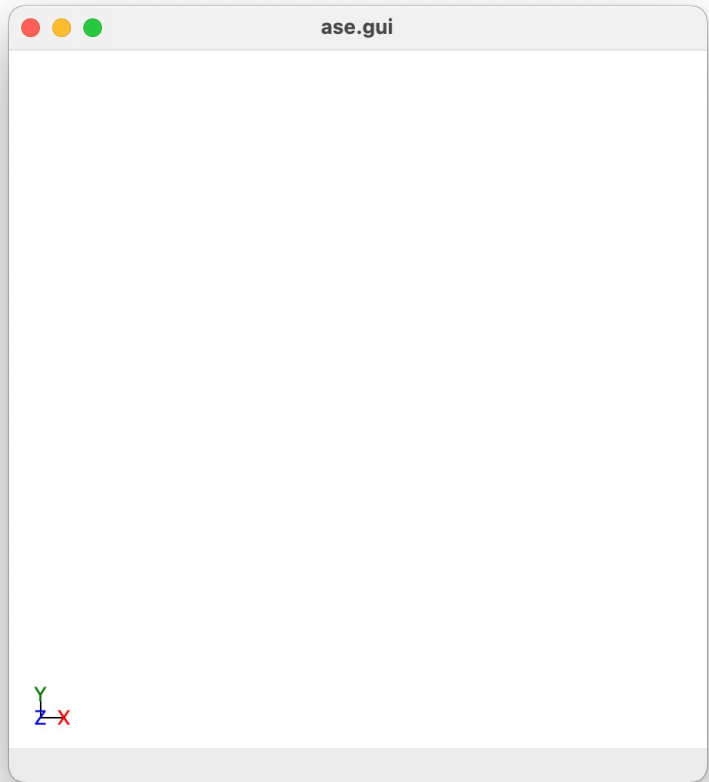


설치가 끝나면 열려있는 터미널을 닫고 재실행



# ASE 설치

```
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$  
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$  
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$  
(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$ ase gui  
enter
```



# VASP: Input files




**INCAR**

**POSCAR**

구조파일

**POTCAR**

**KPOINTS**



## The Materials Project

Harnessing the power of supercomputing and state-of-the-art methods, the Materials Project provides open web-based access to computed information on known and predicted materials as well as powerful analysis tools to inspire and design novel materials.

[Login or Register](#) [See a Random Material](#) [Browse Apps](#)

<https://next-gen.materialsproject.org/>



# VASP: Input files



**INCAR**

**POSCAR**

**POTCAR**

**KPOINTS**

구조파일 (position)

Pt → **System description (설명)**  
 Pt → **Scaling factor (비율)**  
 Pt → **Lattice vector**

```

1.0000000000000000
3.9911171475584890  0.0000000000000000  0.0000000000000000
0.0000000000000000  3.9911171475584890  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.0000000000000000  3.9911171475584890
    
```

Pt → **Elements (원소)**  
 4 → **Numbers (갯수)**

Direct → **Coordinates : Direct (비율), Cartesian (절대좌표)**

```

0.0000000000000000  0.0000000000000000  0.0000000000000000
0.0000000000000000  0.5000000000000000  0.5000000000000000
0.5000000000000000  0.0000000000000000  0.5000000000000000
0.5000000000000000  0.5000000000000000  0.0000000000000000
    
```



# VASP: Input files



**INCAR**

**POSCAR**

**POTCAR**

**KPOINTS**

구조파일 (position)

↗ **System description (설명)**

Ni Pt

1.0000000000000000

↗ **Scaling factor (비율)**

3.8550366000000000

0.0000000000000000

↗ **Lattice vector**

0.0000000000000002

0.0000000000000006

3.8550366000000000

0.0000000000000002

0.0000000000000000

0.0000000000000000

3.8550366000000000

Ni Pt → **Elements (원소)**

1 3 → **Numbers (갯수)**

Cartesian → **Coordinates : Direct (비율), Cartesian (절대좌표)**

0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.0000000000000000

0.0000000000000003 1.9275182999999998 1.9275182999999998

1.9275182999999998 0.0000000000000000 1.9275182999999998

1.9275183000000000 1.9275182999999998 0.0000000000000002



# Materials Project

The Materials Project

Apps About Community ML API

Home / Apps / Materials Explorer

## Materials Explorer

References Documentation

Search for materials information by chemistry, composition, or property.

Materials Si Search

**Filters** Reset

- Composition 1 active
- Thermodynamics
- Structural Properties

**42 materials** match your search  
Showing 1-15

Columns Export Table

✕ Formula: Si

Material ID	Formula	Crystal System	Space Group Symbol	Sites	Energy Above Hull (eV/atom)	Band Gap (eV)
★ <a href="#">mp-149</a>	Si	Cubic	Fd $\bar{3}$ m1	2	0	0.61

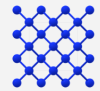


# Materials Project

Home / Apps / Materials Explorer / Si / Si / mp-149

## Materials Explorer

References Documentation



Si  
mp-149

TABLE OF CONTENTS

Summary

Crystal Structure

Properties

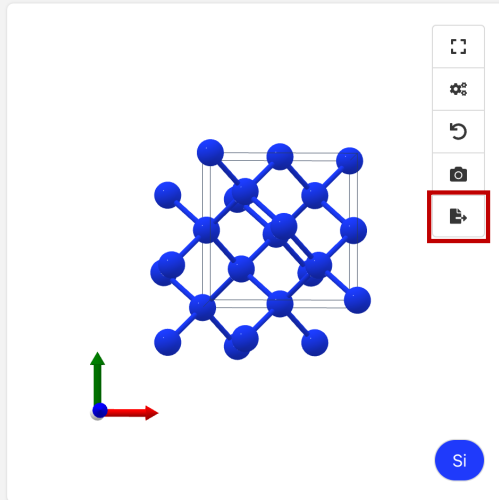
Contributed Data

Literature References

External Links

More

Related Materials



Energy Above Hull	0.000 eV/atom
Space Group	Fd3m
Band Gap	0.61 eV
Predicted Formation Energy	0.000 eV/atom
Magnetic Ordering	Non-magnetic
Total Magnetization	0.00 μB/f.u.
Experimentally Observed	Yes

Description (Auto-generated)  
Si is diamond structured and crystallizes in the cubic Fd3m space group. Si is bonded to four equivalent Si atoms to form corner-sharing SiSi<sub>4</sub> tetrahedra. All Si-Si bond lengths are 2.36 Å.

Export Materials Details

- CIF (Symmetrized)
- CIF
- POSCAR**
- JSON
- Prismatic
- VASP Input Set (MPRelaxSet)



# Materials Project + ASE

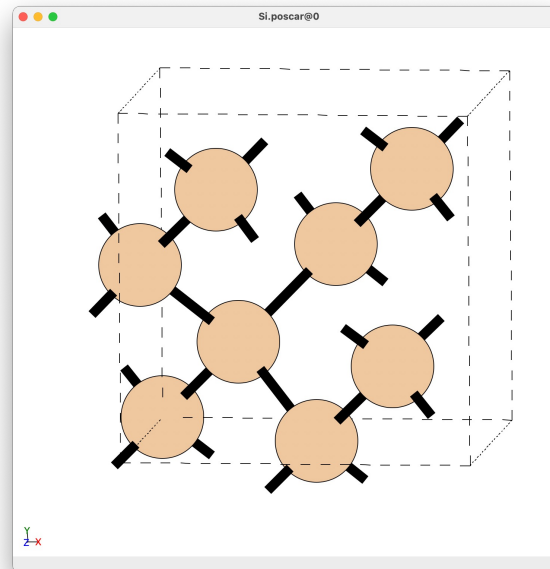
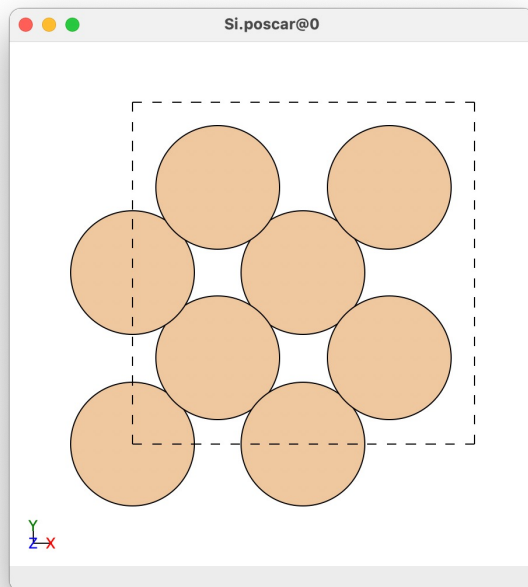
```
Last login: Mon Sep 23 18:37:03 on ttys000
```

```
The default interactive shell is now zsh.
```

```
To update your account to use zsh, please run `chsh -s /bin/zsh`.
```

```
For more details, please visit https://support.apple.com/kb/HT208050.
```

```
[(base) Kihyuns-MacBook-Air:~ kihyun$ ase gui Si.poscar
```



Ctrl + B

Ctrl + a : 원자 추가  
Ctrl + y : 원자 변환  
Ctrl + m : 선택된 원자 이동  
Ctrl + r : 선택된 원자 회전  
r : box 반복  
Ctrl + e : box 사이즈 변경  
x, y, z : x 축, y 축, z 축 시야  
f : 가운데로

좌클릭(+드래그) : 선택  
우클릭 드래그 : 회전  
휠 : 확대/축소

# ChatGPT: Prompt Engineering

## 1. 페르소나 패턴

- 특정 인물이나 역할을 상상하여 질문에 답하는 것.
- 답변의 패턴을 특정 영역으로 제한 가능 (**파이썬 전문가**)

## 2. 레시피 패턴

- 단계별 지시 사항을 따르는 방식으로 답변하는 것.
- 각각의 요소를 알고 있는 경우에 큰 도움 (**특정 라이브러리**)

## 3. 리플렉션 패턴

- 모든 답변에 대한 이유를 설명하도록 GPT에게 요청하는 방식.
- 답변을 이해하는데 도움 (**디버깅**) + 가짜를 구별하기 쉽다

## 4. 거부 차단기 패턴

- GPT가 어떻게든 답변을 하게끔 유도하는 방법
- 지식제한, 안전제한에 대한 부분을 회피 가능 (**계속 에러가 나는 경우**)

## 5. 뒤집힌 상호작용 패턴

- 원하는 것을 달성할 때까지 ChatGPT가 우리에게 역으로 질문하게끔 하는 방식
- 원하는 것은 알지만, 중간단계를 모를 때 도움 (**어떻게 접근 해야 할지 모를 때**)





# ChatGPT: Prompt Engineering

## 0. 일반 질문

K

벌크구조 POSCAR를 만드는 코드를 짜줘



POSCAR 파일은 VASP(Vienna Ab initio Simulation Package) 프로그램에서 사용하는 구조 파일입니다. VASP를 사용하여 계산을 수행하려는 구조의 정보를 담고 있는 파일입니다. 아래에 간단한 Python 코드를 제공하여 벌크 구조의 POSCAR 파일을 만드는 방법을 안내해 드리겠습니다. 이 코드는 구조를 직접 지정하는 간단한 예제입니다. 자세한 구조를 입력하려면 구조의 원자 좌표와 기타 정보를 수정해야 할 수 있습니다.

<https://chat.openai.com/share/88fb4665-2830-4db9-aeec-a55049500f16>

# ChatGPT: Prompt Engineering

## 1. 페르소나 패턴



본인이 VASP 과 Python 을 오랫동안 다뤄온 전문가라고 가정하고 답변해줘. 효율성과 범용성에 주의를 기울여, 저문가의 입장에서 벌크 물질의 POSCAR를 만드는 코딩을 만들어주세요



VASP (Vienna Ab initio Simulation Package)를 사용하여 벌크 물질의 POSCAR 파일을 만드는 Python 코드를 만들어보겠습니다. VASP의 POSCAR 파일 형식은 특정한 구조 정보를 담고 있으며, 이를 생성하기 위해 물질의 구조 정보가 필요합니다. 예를 들어, 결정 구조의 구획 크기, 원자좌표 등이 필요한 정보입니다.

아래는 간단한 Python 코드 예제입니다. 이 코드는 간단한 큐빅 구조 (face-centered cubic, FCC)의 물질을 예로 들고 있습니다. 여기서는 알루미늄 (Al)을 예로 들겠습니다.

<https://chat.openai.com/share/13dbe0a5-ff5e-4f01-8ed9-28747163d8a2>

# ChatGPT: Prompt Engineering

## 2. 레시피 패턴

K

벌크 구조의 POSCAR를 출력하는 파이썬 코드는 만들고자 합니다. 원하는 물질을 입력받아야하고, 관련된 python library가 있는지 검색하고, 물질의 lattice constant 정보를 알아야하고, 원자의 위치를 알아야 한다고 알고 있습니다. 이를 위한 전체 단계를 알려주고, 누락된 부분이 있다면 그 부분을 채워주고, 불필요한 단계가 있다면 알려주세요. 또 다른 새로운 제안이 있다면 제안해 주세요.



벌크 구조의 POSCAR를 출력하는 파이썬 코드를 작성하는 것은 몇 가지 단계로 나눌 수 있습니다. 아래는 전체적인 단계와 필요한 라이브러리, 그리고 각 단계에서의 구체적인 설명입니다.

### 1. 필요한 라이브러리 가져오기:

- 파이썬에서는 Materials Project, pymatgen 또는 ASE(Atomic Simulation Environment)와 같은 라이브러리를 사용하여 구조 정보를 다룰 수 있습니다. 이 예시에서는 pymatgen을 사용하겠습니다.

```
bash
```

Copy code

```
pip install pymatgen
```

### 2. 사용자로부터 물질 정보 입력 받기:

- 사용자로부터 물질의 화학식 또는 구조 정보를 입력 받습니다.


<https://chat.openai.com/share/0740c740-b7fe-4d7c-b53a-3fc6061959ff>



# ChatGPT: Prompt Engineering

## 3. 리플렉션 패턴

**K** 벌크 구조의 POSCAR를 출력하는 파이썬 코드는 만들고자 합니다. 원하는 물질을 입력받아야하고, 관련된 python library가 있는지 검색하고, 물질의 lattice constant 정보를 알아야하고, 원자의 위치를 알아야 한다고 알고 있습니다. 이를 위한 전체 단계를 알려주고, 누락된 부분이 있다면 그 부분을 채워주고, 불필요한 단계가 있다면 알려주세요. 또 다른 새로운 제안이 있다면 제안해 주세요. 모든 답변에 대해서 이유를 설명해 주세요

 벌크 구조의 POSCAR 파일을 생성하는 파이썬 코드를 만들려면 다음 단계를 따를 수 있습니다. 이 작업은 두 가지 주요 부분으로 나뉩니다. 먼저, 원하는 물질의 결정 구조 정보를 얻어오고, 그런 다음 POSCAR 파일을 생성하는 코드를 작성해야 합니다.

1. 원하는 물질 결정 구조 정보 수집:
  - 먼저, 원하는 물질의 결정 구조 정보를 얻어야 합니다. 이 정보는 결정 구조, 격자 상수, 원자 위치 등을 포함합니다.
  - 이 정보를 얻는 방법은 여러 가지가 있을 수 있으며, 대표적인 방법으로는 물질의 결정 구조 데이터베이스에서 정보를 검색하거나, 다른 소프트웨어나 라이브러리를 사용하여 계산 결과를 얻는 것이 있습니다.
2. POSCAR 파일 생성:
  - 결정 구조 정보를 기반으로 POSCAR 파일을 생성해야 합니다. POSCAR 파일은 VASP (Vienna Ab initio Simulation Package)와 같은 전자 구조 계산 소프트웨어에서 사용되는 파일 형식입니다.
  - POSCAR 파일 형식은 다음과 같습니다:

<https://chat.openai.com/share/86a585c9-7ee2-4aa5-8fde-2fcaecd2a262>



# ChatGPT: Prompt Engineering

## 5. 뒤집힌 상호작용 패턴

K

벌크 구조의 POSCAR를 만들기 위한 python 코딩을 만드려고해. 성공적으로 작동하기 위해서 필요한 모든 질문들을 나에게 해주세요. 필요한 모든 정보를 얻으면 전체 python 코드를 출력해줘



벌크 구조의 POSCAR 파일을 생성하는 Python 코드를 작성하려면 다음과 같은 정보와 단계가 필요합니다. 아래의 질문에 답하시면, 전체 Python 코드를 제공해 드릴 수 있을 것입니다.

1. 어떤 결정 구조(큐빅, 바싸, 페이스센터 큐빅, 등)를 가진 물질을 다루고 있나요?
2. 결정 구조의 단위 격자 상자 크기(a, b, c)를 알려주세요.
3. 격자 상자 각 변의 각도 (alpha, beta, gamma)를 알려주세요.
4. 단위 격자 상자 내에서 원자의 종류 및 수를 제공하세요.
5. 각 원자의 종류와 단위 격자 상자 내 좌표를 알려주세요.
6. 선택적으로, 기타 정보를 POSCAR 파일에 추가하고 싶은 경우, 그 정보도 알려주세요 (예: 선택적 태그, 질량, 전기적 또는 자기 모멘트 등).

위의 정보를 제공하면 필요한 Python 코드를 생성하는 데 도움이 될 것입니다.

<https://chat.openai.com/share/c5f61359-c59e-4a57-b952-7440493733df>



# ChatGPT - 실습

1. 사용자가 문자열을 입력 받아  $a \rightarrow w, b \rightarrow x, c \rightarrow y, d \rightarrow z$  로 변환하는 프로그램을 만드시오.  
예시: 입력 : abcdeftz → 출력 : wxyzeftz
2. 다음 주어진 문자열에서 모든 대문자를 소문자로 변환하고, 문자 ';' 와 '.'을 제거한 후 각 단어를 순서대로 출력 하는 프로그램을 만드시오. 단 중복되는 단어는 한번만 출력 되어야 하고 단어가 문자열에서 발생한 횟수도 함께 출력한다. 사전을 이용: 단어-key, 발생횟수-value s = 'We propose to start by making it possible to teach programming in Python, an existing scripting language, and to focus on creating a new development environment and teaching materials for it.'  
예시 : 입력 받는게 없고, 출력 : We 1번, ... It x번
3. 자연수를 입력 받아 소수 인지, 합성수인지 구분할 수 있는 프로그램을 만드시오.
4. 자연수를 입력 받아 원하는 진수 (2 ~ 16진수)로 변환하는 프로그램을 만드시오.
5. Si diamond bulk structure POSCAR (unit cell)를 만드는 프로그램을 만드시오.
6. 위의 POSCAR를 활용하여 (001)면의 표면을 만드는 프로그램을 만드시오 (z축 방향으로 vacuum 10Å).

