

# Modul Praktikum

## Pengenalan ASE dan GPAW

Fadjar Fathurrahman

2019

### 1 Tujuan

### 2 Perangkat lunak yang diperlukan

### 3 Pengenalan ASE

ASE (Atomic Simulation Environment) adalah kumpulan modul dan *script* Python untuk mempersiapkan, memanipulasi, menjalankan, menggambarkan (visualisasi) and menganalisis simulasi atomistik.

Kita akan menggunakan ASE untuk membuat struktur atomistik.

Beberapa kelas (tipe data) penting pada ASE: Atoms dan Calculator

```
import ase  
atoms = bulk("Cu", "fcc")
```

Test math:

$$V(\mathbf{r}) = V_{Ha}(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \quad (1)$$