

# Pengenalan ASE (Atomic Simulation Environment)

Fadjar Fathurrahman

Program Studi Teknik Fisika  
Divisi Komputasi Pusat Penelitian Nanosains dan Nanoteknologi  
Institut Teknologi Bandung

23 April 2018

# Atomic Simulation Environment

Merupakan pustaka Python untuk melakukan mempermudah *workflow* dalam teknik simulasi berbasis atom seperti DFT dan MD.

Mempermudah *scripting*

# Membuat struktur atomik

```
from ase import Atoms
atoms = Atoms("Ni4", [(0, 0, 0),
                      (1.45, 0, 0),
                      (1, 1.5, 0),
                      (1.5, 1.5, 0)],
              cell=[5, 5, 5])
atoms.set_pbc([True, True, True]) # anggap sebagai struktur periodik
```

Simpan struktur atom dalam beberapa format:

```
atoms.write("Ni4.xyz") # extended XYZ format
atoms.write("Ni4.xsf") # Xcrysden format
```

# Visualisasi sederhana

Visualisasi dengan ase-gui:

```
import ase.visualize
ase.visualize(atoms)
```

Simpan hasil visualisasi dalam format EPS (*encapsulated postscript*)

```
ase.visualize.write("Ni4.pdf", atoms, format="eps")
```

# ASE calculator

Dapat menggunakan program eksternal:

