

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), (2.0, 0, 0), (0.0, 2.0, 0), (2.0, 2.0, 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
```

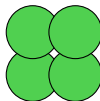
Visualisasi sederhana

Visualisasi dengan ase-gui:

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

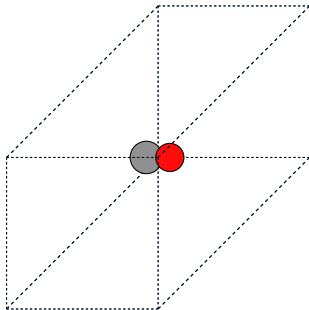
Simpan hasil visualisasi dalam format EPS (*encapsulated postscript*)

```
ase.visualize.write("Ni4.eps", atoms, format="eps")  
# ase.io.write (dengan signature fungsi yang sama) juga dapat digunakan
```



Contoh

```
from ase import Atoms, Atom
from ase.io import write
b = 7.1
atoms = Atoms([Atom("C", [0., 0., 0.]),
               Atom("O", [1.1, 0., 0.])],
              cell=[[b, b, 0.],
                   [b, 0., b],
                   [0., b, b]])
print("Volume = {0:1.0f} Ang^3".format(atoms.get_volume()))
atoms.center()      # translasi atoms ke tengah sel
write("CO-in-fcc.eps", atoms, show_unit_cell=2)
```



ASE calculator

Dapat menggunakan program eksternal:

