

Python **Materials** Genomics

pymatgen

Sobre o Palestrante

Graduando em Física pela Ufma

pymatgen

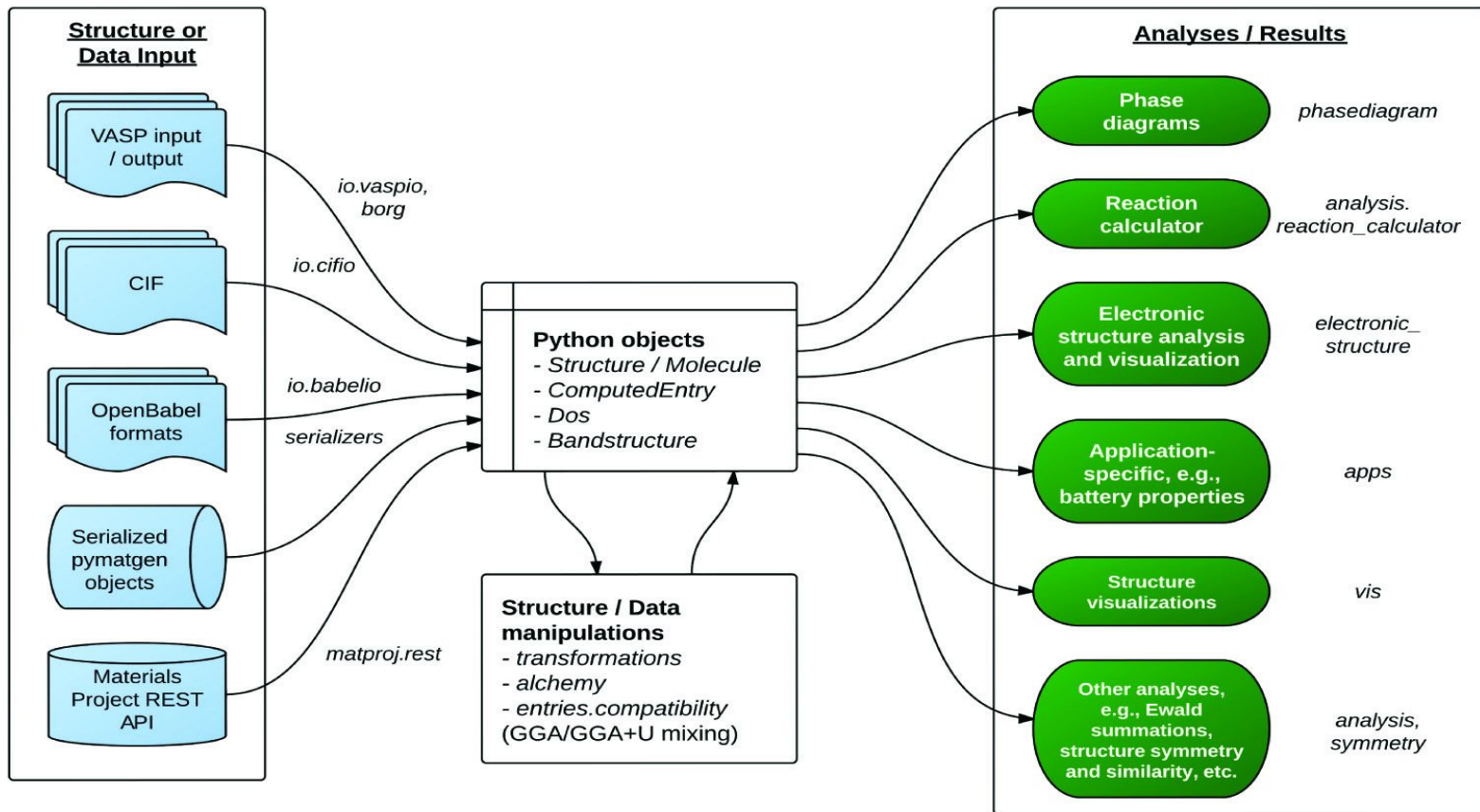
(Python **Materials** Genomics)

Pymatgen

É uma biblioteca Python robusta e de código aberto para análise de materiais e tem algumas características:

- Classes altamente flexíveis para a representação dos Elementos, Molécula, Estrutura.
- Suporte abrangente de entrada / saída, incluindo suporte para VASP (<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>).
- Poderosas ferramentas de análise, incluindo geração de diagramas de fase, diagramas Pourbaix, reações, etc.
- Análises de estrutura eletrônica, como densidade de estados e estrutura de banda.
- Integração com o Projeto de Materiais REST API, Crystallography Open Database.

Visão geral de um fluxo de trabalho típico para pymatgen.



Py**mat**gen e os **módulos**

- Numpy
- Scipy
- Matplotlib
- Monty
- Requests
- Pybtex
- Pyyaml
- Tabulate
- Six
- Sympy



MATERIALS PROJECT



Search for materials information by chemistry, composition, or property

Explore Materials

[Advanced Search Syntax](#)

1 H		<div><div><div>by Elements</div><div>Na-O</div><div>×</div><div>search</div></div></div>																2 He																																				
3 Li		4 Be																		5 B		6 C		7 N		8 O		9 F		10 Ne																								
11 Na		12 Mg																		13 Al		14 Si		15 P		16 S		17 Cl		18 Ar																								
19 K		20 Ca		21 Sc		22 Ti		23 V		24 Cr		25 Mn		26 Fe		27 Co		28 Ni		29 Cu		30 Zn		31 Ga		32 Ge		33 As		34 Se		35 Br		36 Kr																				
37 Rb		38 Sr		39 Y		40 Zr		41 Nb		42 Mo		43 Tc		44 Ru		45 Rh		46 Pd		47 Ag		48 Cd		49 In		50 Sn		51 Sb		52 Te		53 I		54 Xe																				
55 Cs		56 Ba		57-71 La-Lu		72 Hf		73 Ta		74 W		75 Re		76 Os		77 Ir		78 Pt		79 Au		80 Hg		81 Tl		82 Pb		83 Bi		84 Po		85 At		86 Rn																				
87 Fr		88 Ra		89-103 Ac-Lr		104 Rf		105 Db		106 Sg		107 Bh		108 Hs		109 Mt		110 Ds		111 Rg		112 Cn																																
																									57 La		58 Ce		59 Pr		60 Nd		61 Pm		62 Sm		63 Eu		64 Gd		65 Tb		66 Dy		67 Ho		68 Er		69 Tm		70 Yb		71 Lu	
																									89 Ac		90 Th		91 Pa		92 U		93 Np		94 Pu		95 Am		96 Cm		97 Bk		98 Cf		99 Es		100 Fm		101 Md		102 No		103 Lr	

of elements

e.g., 4 or >2 & <6

excluded elements

Cl Br

Submit

Material Tags

Imagite

Band Gap (eV)

0 10

Energy Above Hull

0 6

Formation Energy

-4 4

Links e referência

- <http://pymatgen.org/index.html>
- <https://materialsproject.org/>
- <https://github.com/materialsproject/pymatgen>
- <https://groups.google.com/forum/?fromgroups#!forum/pymatgen>