

## POSCARtoolkit.py 功能描述，适用于 python2.7

1. 将 POSCAR 或者 CONTCAR 中分数坐标转化为笛卡尔坐标

用法: python POSCARtoolkit.py -i POSCAR

```
C:\Users\ppliv\Desktop>python POSCARtoolkit.py -i POSCAR

#####
# For VASP 5.2 or higher versions #
#           Author:Li, Q;Xu, N       #
#           Verision 1.2             #
#####

File to be handled is *****POSCAR*****

This POSCAR has Direct Coordinations, Conversion is starting...

-----
POSCAR with Cartesian Coordinations is named as POSCAR_C
-----
```

描述: 将含有分数坐标的 POSCAR 转换成笛卡尔坐标的 POSCAR\_C, 如果 POSCAR 已经为笛卡尔坐标转换终止。

2. 根据 Z 方向的原子坐标, 固定底部几层原子

用法: python POSCARtoolkit.py -i POSCAR\_C -f

```
C:\Users\ppliv\Desktop>python POSCARtoolkit.py -i POSCAR_C -f

#####
# For VASP 5.2 or higher versions #
#           Author:Li, Q;Xu, N       #
#           Verision 1.2             #
#####

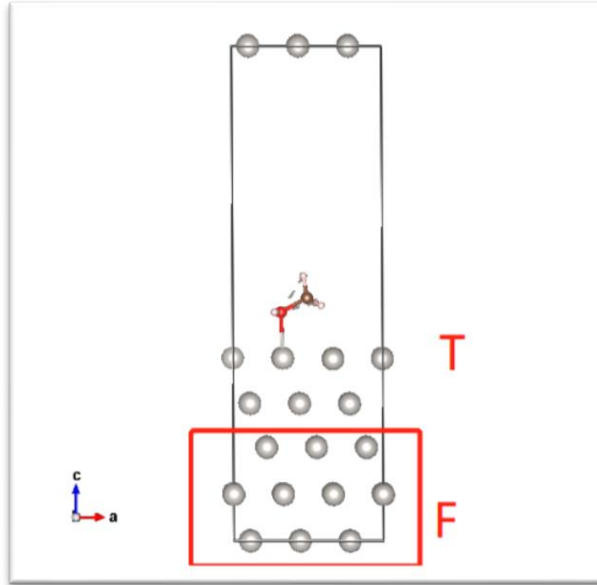
File to be handled is *****POSCAR_C*****

-----
Cartesian Coordinates found, only for fixing atoms!
Then type how many layers to be fixed, from bottom to top.
-----

Found 7 layers, choose how many layers to be fixed----->3

-----
POSCAR with Cartesian Coordinations is named as POSCAR_C_C

Atom fix completed, if layers are not separated properly,
Please alter thresholds with flags -y or type -h for help!
-----
```



描述：根据阈值  $1.5 \text{ \AA}$  划分层（可以通过 `-y 1.0` 自己定义更小的阈值），根据用户的选择 3，固定底下三层原子，而其他原子放开。

### 3. 选择部分原子放开，固定或者部分放开

前提：POSCAR 或者 CONTCAR 中有 “Selective dynamics” 信息

用法：python POSCARtoolkit.py -i POSCAR\_C [-f or -r] -s [your selections]

```
C:\Users\ppliv\Desktop>python POSCARtoolkit.py -i POSCAR_C -f -s all
```

```
#####
# For VASP 5.2 or higher versions #
#       Author:Li,Q;Xu,N         #
#       Version 1.2              #
#####
```

```
File to be handled is *****POSCAR_C*****
```

```
-----
Cartesian Coordinates found, only for fixing atoms!
Then atoms selected will be fixed.
-----
```

```
-----
POSCAR with Cartesian Coordinations is named as POSCAR_C_C
```

```
Atom fix completed, if layers are not separated properly,
Please alter thresholds with flags -y or type -h for help!
-----
```

描述：-s 选项表示选择部分原子

-s 选项解析：

all 表示选中所有原子

1-5 6 9 表示选中 第 1-5 个和 6,9 号原子

Pt 表示选中所有的 Pt 原子

1-5 6 9 Pt 表示选中 第 1-5 个和 6,9 号原子和所有的 Pt 原子

-f 配合 -s 表示选择性固定选中的原子，其他原子的位置限制信息不变

```
C:\Users\ppliv\Desktop>python POSCARtoolkit.py -i POSCAR_C -r FF T -s all

#####
# For VASP 5.2 or higher versions #
#           Author:Li,Q;Xu,N       #
#           Version 1.2             #
#####

File to be handled is *****POSCAR_C*****

Your selective choice is ***** FFT *****!

-----

Cartesian Coordinates found, only for relaxing atoms!
Then atoms selected will be relaxed.

-----

POSCAR with Cartesian Coordinations is named as POSCAR_C_C
-----
```

-r 配合 -s 表示选择性放开选中的原子，其他原子的位置限制信息不变

-r [ F F T ] 配合 -s 表示选择性将选中的原子的位置限制信息变为 FFT，其他原子的位置限制信息不变。

如果原来的 POSCAR 或者 CONTCAR 没有 “Selective dynamics” 信息，则可通过功能 2 先固定所有的原子层，再进行选择性操作。 命令如下：python POSCARtoolkit.py -i CONTCAR -f 选择所有层固定生成 CONTCAR\_C 再通过 python POSCARtoolkit.py -i CONTCAR\_C -r -s Pt 放开所有 Pt 原子。