科研实践报告

摘 要

晶体是我们计算物理研究的主要对象之一，晶体中存在晶面和晶向的定义，以及其对应的指数的定义。我们通过一个程序可以在命令行中轻松地将这两种指数相互转换。这个程序包含了 Python 中的 ase, argparse, fractals 等程序库。

关键字： 晶向；晶面；Python ASE(Atomic Simulation Environment) ；Python Argparse ；Python Fractals ；

背景:

晶体的结构有对称性和周期性，而且周期性的方向不一定是沿着直角坐标的三个坐标轴的方向，所以我们在研究晶体的时候要引入另外一组基矢，基矢的方向就是晶胞的三条棱的方向。

确定晶面指数有三个步骤：

1) 先求出该晶面与晶体中的基矢的轴相交的长度 r,s,t;
2) 分别取它们的倒数$\frac{1}{r},\frac{1}{s},\frac{1}{t}$, 并对这三个分数进行通分；
3) 通分后三个分数的分子就是这个晶面的晶面指数 h,k,l。

确定晶向指数也有三个步骤：

1) 先做一条平行于该晶向的直线，并使其通过坐标原点；
2) 在这条直线上任取一点，求其原子坐标；
3) 化为最简整数比，即为晶向指数, 用[u v w]表示。[1]

通过以上的分析，我们可以对晶面指数和晶向指数进行转换，对应的晶

面和晶向是垂直的。在此就引出这两种指数转换的公式：

给定一个晶面的系数 h,k,l,将晶面与整个晶体的基矢$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$的交点分别记作 A, B, C,将基矢的原点记作 O，将与这个晶面垂直的晶向向量记作$\vec{o}$。那么$\overrightarrow{OA}=c*\frac{1}{h}\vec{a}$, $\overrightarrow{OB}=c*\frac{1}{k}\vec{b}$, $\overrightarrow{OC}=c*\frac{1}{l}\vec{c}$, 其中 c 为常数。方便起见，不妨设 c=1. 又因为$\vec{o}$ 垂直晶面，而$\overrightarrow{AB},\overrightarrow{BC}$属于晶面，所以$\vec{o}$垂直$\overrightarrow{AB},\overrightarrow{BC}$。又因为$\vec{o}$=u$\vec{a}$+v$\vec{b}$ +w$\vec{c}$, $\overrightarrow{AB}$ =$\overrightarrow{OA}-\overrightarrow{OB}$, $\overrightarrow{BC}=\overrightarrow{OB}-\overrightarrow{OC}$，故

$$(u\vec{a}+v\vec{b}+w\vec{c})\bullet(\frac{1}{h}\vec{a}-\frac{1}{k}\vec{b})=0$$

$$(u\vec{a}+v\vec{b}+w\vec{c})\bullet(\frac{1}{k}\vec{b}-\frac{1}{l}\vec{c})=0$$

只有两个方程，但是有三个未知数，所以只能解出$\frac{v}{u}$和$\frac{w}{u}$：

$$\frac{v}{u}=\frac{(l*bc-k*cc)*(h*ab-k*aa)-(k*ac-h*bc)*(k*ac-l*ab)}{(l*bc-k*cc)*(k*ab-h*bb)-(k*ac-h*bc)*(l*bb-k*bc)}$$

$$\frac{w}{u}=\frac{(k*ac-l*ab)*(k*ab-h*bb)-(h*ab-k*aa)*(l*bb-k*bc)}{(l*bc-k*cc)*(k*ab-h*bb)-(k*ac-h*bc)*(l*bb-k*bc)}$$

观察到两个解的分母相同,故 u：v：w = $(l*bc-k*cc)*(k*ab-h*bb)-(k*ac-h*bc)*(l*bb-k*bc)$ ： $(l*bc-k*cc)*(h*ab-k*aa)-(k*ac-h*bc)*(k*ac-l*ab)$ ： $(k*ac-l*ab)*(k*ab-h*bb)-(h*ab-k*aa)*(l*bb-k*bc)$。

然后我们只要求出 u,v,w 的最简整数比就行了。

u:v:w 的最简整数比就是他们各自除以 u,v,w 的最大公约数 gcd(u,v,w)即可。

同理，已知 u,v,w 时，利用同一个方程组，可以解得

$$\frac{h}{k}=\frac{u*aa+v*ab+w*ac}{u*ab+v*bb+w*bc}$$

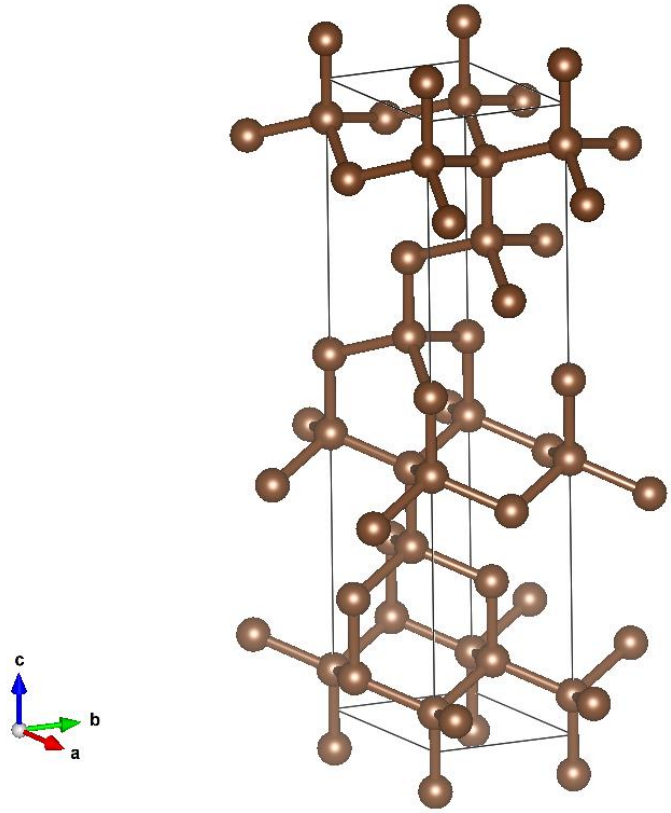
$$\frac{l}{k}=\frac{u*ac+v*bc+w*cc}{u*ab+v*bb+w*bc}$$

同理，它们的最简整数比就是它们解中的比例除以 h,k,l 的最大公约数。

通过以上的方法，我们就能设计出将晶面指数和晶向指数转换的程序了。

工作内容:

学习使用 VESTA 软件观察晶体的晶胞的情况。具体的测试的 POSCAR 文件如下图所示：



自学有关晶向晶面的内容。编写了一个用于转换晶体晶面和晶向指数的函数。

阅读 Python 的 ase 库的源代码[2]以及安装之后位于 C:\Python27\Lib\site-packages\ase\io\vasp.py 本地文件的源代码中的 read_vasp 函数，我们可以看到 get_cell 函数和 read_vasp 函数可以配合从一个 POSCAR 文件中读取晶体的基矢的向量坐标参数。

通过阅读 Python 的 argparse 文档，将原来的程序包装成一个可以读取命令行参数的程序，通过输入-m,-i 和 POSCAR 文件的名字可以分别在晶向和晶面指数之间相互转换[3]。

最终程序的源代码：

```
# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Wed Mar 15 18:44:03 2017

@author: 93137
"""
import ase
import ase.io.vasp as vp
import numpy as np
import argparse

tolerance = 1e-2


parser = argparse.ArgumentParser(description='Convert miller index.')
parser.add_argument('index', metavar='INDEX', type=str,
                    help='the index can either be miller index or orientation index')
parser.add_argument('poscar', metavar='POSCAR', type=str,
                    help='poscar file where basis vectors come from')
parser.add_argument('-m', dest='miller', action='store_true',
                    help='convert miller index to orientation index')
parser.add_argument('-i', dest='orientation', action='store_true',
                    help='convert orientation index to miller index')
args = parser.parse_args()
abc = ase.Atoms.get_cell(vp.read_vasp(args.poscar))

def gcd(a,b):
    '''Calculate the Greatest Common Divisor of a and b
    '''
    while (b != 0) :
        c = a % b
        a = b
        b = c
    return a

def stridx2intidx(stridx):
    '''Convert the index like '1,m3,1' to '1,-3,1'
    '''
    strarray = stridx.split(',')
    intidx = [0,0,0]
    for i in range(3):
        if strarray[i][0] == 'm':
            intidx[i] = -1 * int(strarray[i][1:])
        else:
            intidx[i] = int(strarray[i])
    return intidx

def ratioconvert(numerator,denominator,tolerance):
    '''Convert a ratio of two floats into the ratio of two integers.
    Tolerance means the tolerance of the bias bewteen these two ratios.
    '''
    prec = 1e-3
    multiple = int(round(np.log10(1 / tolerance)))
```

```
    scale = int(round(np.log10(abs(float(numerator) / float(denominator)))))
    scale_num = int(round(np.log10(abs(float(numerator)))))
    intden = 10**multiple
    if (abs(numerator) <= prec)&(abs(denominator) <= prec):
        return [0,0]
    elif abs(numerator) <= prec:
        return [0,intden]
    elif abs(denominator) <= prec:
        intnum = int(round(float(numerator),multiple - scale_num) * intden)
        return [intnum,0]
    else:
        intnum = int(round(float(numerator) / float(denominator),multiple - scale) * intden)
        return [intnum,intden]

def absvec(abc):
    '''Make the coordinates of vector positive
    '''
    n = 0
    for i in range(3):
        if (abc[i] < 0):
            n = n + 1
    if n >= 2:
        for i in range(3):
            abc[i] = (-1)*abc[i]
    return abc

def hkl2uvw(hkl,abc,tolerance):
    '''Convert the miller index h,k,l into its related orientation index u,v,w
    '''
    h,k,l = hkl[0],hkl[1],hkl[2]
    a,b,c = abc[0],abc[1],abc[2]
    aa,bb,cc,ab,ac,bc = np.dot(a,a),np.dot(b,b),np.dot(c,c),np.dot(a,b),np.dot(a,c),np.dot(b,c)
    u1 = (l*bc-k*cc)*(k*ab-h*bb)-(k*ac-h*bc)*(l*bb-k*bc)
    v1 = (l*bc-k*cc)*(h*ab-k*aa)-(k*ac-h*bc)*(k*ac-l*ab)
    w1 = (k*ab-h*bb)*(k*ac-l*ab)-(l*bb-k*bc)*(h*ab-k*aa)
    #We have already solve the value of v/u and w/u
    #Code below aims at turn u,v,w into their smallest integers
    u2 = ratioconvert(u1,v1,tolerance)[0]
    v2 = ratioconvert(u1,v1,tolerance)[1]
    w2 = ratioconvert(w1,v1,tolerance)[0]
    gcd_uvw = gcd(gcd(abs(u2),abs(v2)),abs(w2))
    u = u2 / gcd_uvw
    v = v2 / gcd_uvw
    w = w2 / gcd_uvw
    return absvec([u,v,w])

def uvw2hkl(uvw,abc,tolerance):
    '''Convert the orientation index h,k,l into its related miller index u,v,w
    '''
    u,v,w = uvw[0],uvw[1],uvw[2]
    a,b,c = abc[0],abc[1],abc[2]
    aa,bb,cc,ab,ac,bc = np.dot(a,a),np.dot(b,b),np.dot(c,c),np.dot(a,b),np.dot(a,c),np.dot(b,c)
    h1 = u*aa + v*ab + w*ac
    k1 = u*ab + v*bb + w*bc
    l1 = u*ac + v*bc + w*cc
    #We have already solve the value of h/k and l/k
    #Code below aims at turn h,k,l into their smallest integers
```

```
    h2 = ratioconvert(h1,k1,tolerance)[0]
    k2 = ratioconvert(h1,k1,tolerance)[1]
    l2 = ratioconvert(l1,k1,tolerance)[0]
    gcd_hkl = gcd(gcd(abs(h2),abs(k2)),abs(l2))
    h = h2 / gcd_hkl
    k = k2 / gcd_hkl
    l = l2 / gcd_hkl
    return absvec([h,k,l])

if args.miller :
    print hkl2uvw(stridx2intidx(args.index),abc,tolerance)
if args.orientation :
    print tuple(uvw2hkl(stridx2intidx(args.index),abc,tolerance))
```

困难:

虽然整个晶面和晶向转换的程序原理看起来简单，但是在程序运行的过程中需要考虑的因素有很多，比如分母为零的情况，输出的结果的坐标大部分是负数的情况。我们还要考虑怎么将几个整数值比转化为最简整数比，

在将晶体的晶面指数（Miller 指数）转换为晶向的指数的函数的时候，由于刚开始只考虑到了基矢$\vec{a},\vec{b},\vec{c}$的各个坐标的值是整数的情况,但实际上基矢的各个坐标可以是任意的小数,所以在原来的只能处理 int 类型的变量的情况下要增加处理 float 类型变量的情况。为了增加这种情况，我们要将两个 float 类型变量的除法转换为两个 int 类型变量的除法。

但是这种转换的方法并不简单，可能会遇到各种各样的问题，而且由于浮点数的不精确性（因为计算机记录浮点数是以 2 的次方形式记录的），所以其实浮点数在小于一定的数值（比如 1e-15）的情况下就可以认为是零了。所以还要加入一定的零的判断语句。

但是这里存在一个精确度和合理性的矛盾，如果把精确度调整得太高，那么可能会得出一些指数比例相差巨大的解，比如[3800000, 1, 237000],这种解一般不是我们期望的解，我们可以将其转换为[1460, 0, 91]这样的结果，或者更不精确一点就是[50, 0, 3]。

从中我们可以看到，随着结果的简洁性越来越好，结果的精确度也越来越差，所以我们要在简洁性和精确性中进行取舍。

在学长的指导下，我知道了有 Python 的 Fractals 库，这个库提供了将 float 的除法转换为 int 的除法，相当于可以替换我所写的源代码中的 ratioconvert 函数，不过这个库的具体的使用方法我目前还没有掌握。

后续工作计划:

深入了解有关晶向、晶面等晶体相关的内容。

继续完善晶向晶面指数转换的 py 文件，优化代码，同时提升精确度和准确性。

研究脚本作图（示意图）软件

Solides usuels （ http://asy.marris.fr/asymptote/Solides/index.html ）
Surfaces 3D （ http://asy.marris.fr/asymptote/Surfaces_3D/index.html ）
http://asymptote.sourceforge.net/gallery/2D%20graphs/index.html

参考文献：

[1] 第四章 晶向、晶面等概念, 吉林大学微纳传感与器件实验室. Retrieved at March 25, 2017, from http://smdlab.jlu.edu.cn/background/attachments/crystallography/chapter4.pdf
[2] Source code for ase.atoms, Atomic Simulation Environment. Retrieved at March 25, 2017, from https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/_modules/ase/atoms.html#Atoms.get_celldisp
[3] argparse — Parser for command-line options, arguments and sub-commands. Retrieved at March 19, 2017, from https://docs.python.org/2/library/argparse.html