

CrystalTools

功能概览

CrystalTools 是一个基于 Python 的晶体学计算工具，使用 `numpy` 完成核心计算，`ase` 和 `tkinter` 可选，用于读取 CIF 文件获取晶胞参数。工具分为三个主要部分，每部分相互独立，用户可根据需求选择运行。

功能模块

1. 晶胞参数相关计算

- 晶面间距计算
- 晶带轴、晶面夹角计算
- 晶向和晶面的转换（和晶面法线平行的晶向或者反过来）
- 叉乘计算（两晶面所在晶带轴、两晶带轴所在晶面）
- 晶面筛选（遍历所有 $(x, x, x) (x, x, x) (x, x, x)$ 范围内晶面间距小于 d_{min} 的晶面，计算和指定晶面夹角为 θ 的所有晶面）
- 晶向筛选（计算和指定晶向夹角为 θ 的所有晶向）

2. 晶胞转换相关计算

- 已知转换矩阵求不同坐标系下晶面/晶向的对应关系
- 已知晶面或者晶向的对应关系求转换矩阵
- 三个坐标系之间的转化矩阵

3. 六角晶系三四指数转换

- 晶向指数变换
 - 晶面指数变换
 - 等价晶向计算
 - 等价晶面计算
-

使用说明

步骤一：确定目标计算模块

- 根据需求选择模块：
 - 晶胞参数相关计算 → 模块 1
 - 晶胞转换相关计算 → 模块 2
 - 六角晶系三四指数转换 → 模块 3

例：晶胞参数相关计算

翻到此处（不需要任何其他操作）。

▼ 1、晶胞参数相关计算

- 1.1 晶面间距计算
- 1.2 晶带轴、晶面夹角计算
- 1.3 晶向和晶面的转换
- 1.4 叉乘计算（两晶面所在晶带轴、两晶带轴所在晶面）
- 1.5 晶面筛选
- 1.6 晶向筛选（批量计算）

输入晶胞参数（仅模块 1 需要）：

▼ 晶胞参数输入(nm)：（手动输入或者直接读取，二者选其一即可）

```
[1]: # 方式1：手动输入晶胞参数
a = 0.5828
b = 0.5828
c = 0.5828
alpha = 90
beta = 90
gamma = 90

[1]: # 方式2：直接通过cif或者POSCAR文件读取晶胞参数
# 需要ase和tkinter库

from ase.io import read
from tkinter import Tk, filedialog

# 弹窗选择文件
root = Tk()
root.withdraw() # 隐藏主窗口
file_path = filedialog.askopenfilename(
    title='Choose CIF or POSCAR file',
    filetypes=[("Structure files", "*.cif *.vasp *.poscar *.CONTCAR *.POSCAR"), ("All files", "*.*")])
)
```

步骤二：运行类定义

- 找到对应模块的类定义，运行该类定义代码。

例如：

```
[3]: import numpy as np

class Lattice:
    def __init__(self, a, b, c, alpha, beta, gamma):
        """
        Initialize lattice parameters.

        Parameters:
        a, b, c : lattice constants (Å)
        alpha, beta, gamma : lattice angles (degrees)
        """

        self.a = a
        self.b = b
        self.c = c
        self.alpha = alpha
        self.beta = beta
        self.gamma = gamma

        # Build metric tensors
        self.G = self._build_G()
        self.G_star = np.linalg.inv(self.G)

    def _build_G(self):
        """Construct the real-space metric tensor G (3x3)."""

        α = np.deg2rad(self.alpha)
        β = np.deg2rad(self.beta)
        γ = np.deg2rad(self.gamma)

        G = np.array([
            [1, 0, 0],
            [0, 1, 0],
            [0, 0, 1]
        ])

        return G
```

步骤三：执行具体计算

- 找到需要的计算功能
- 按要求输入参数，运行方法即可得到结果。

例：计算晶面指数的叉乘：

▼ 1.4 叉乘计算（两晶面所在晶带轴、两晶带轴所在晶面）

```
[237]: # 输入两个晶面
h1, k1, l1 = -1, 1, 3
h2, k2, l2 = 5, -1, 5
# 转化为整数允许的误差（一般0.05 ~ 0.5 * 100%）
tol = 0.2

hkl1 = [h1, k1, l1]
hkl2 = [h2, k2, l2]
uvw_float, uvw_int = lattice.direction_from_planes(hkl1, hkl2, tol)
print(f"Direction perpendicular to planes {hkl1} & {hkl2}: float = {uvw_float}, int = {uvw_int}")

Direction perpendicular to planes [-1, 1, 3] & [5, -1, 5]: float = [ 8. 20. -4.], int = [ 2 5 -1]
```

注意事项

1. 各模块（1、2、3）相互独立，不会影响彼此。
2. 同一部分内部不同功能可单独使用。

3. 若使用 CIF 文件获取晶胞参数，需要安装 `ase` 和 `tkinter` 并按提示读取文件。
4. 每次使用前先运行对应类定义