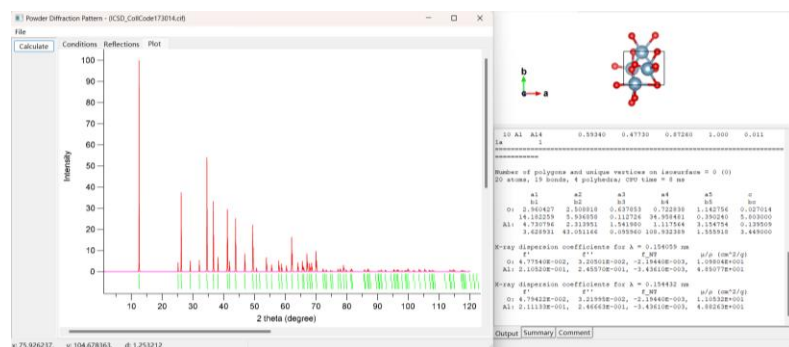
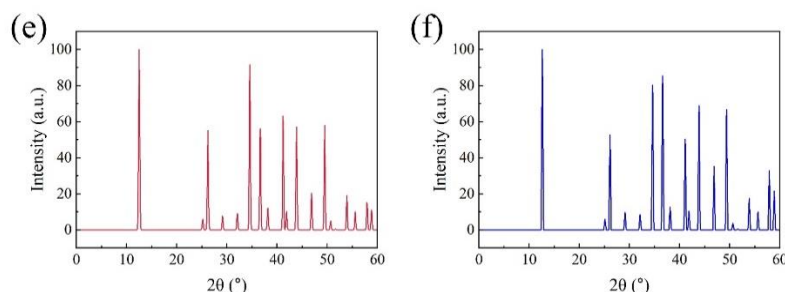


2024.06.24, 版本 0.0.0: 各部分注意点和改进点如下,

X 射线衍射：1、相比 VESTA，ICSD_CollCode173014 Al₂O₃ 结构衍射表现较差，该结果是否源于原子散射因子高斯公式不同仍有待商榷（VESTA 高斯公式参考 [14 UTILITIES \(jp-minerals.org\)](http://jp-minerals.org)）；



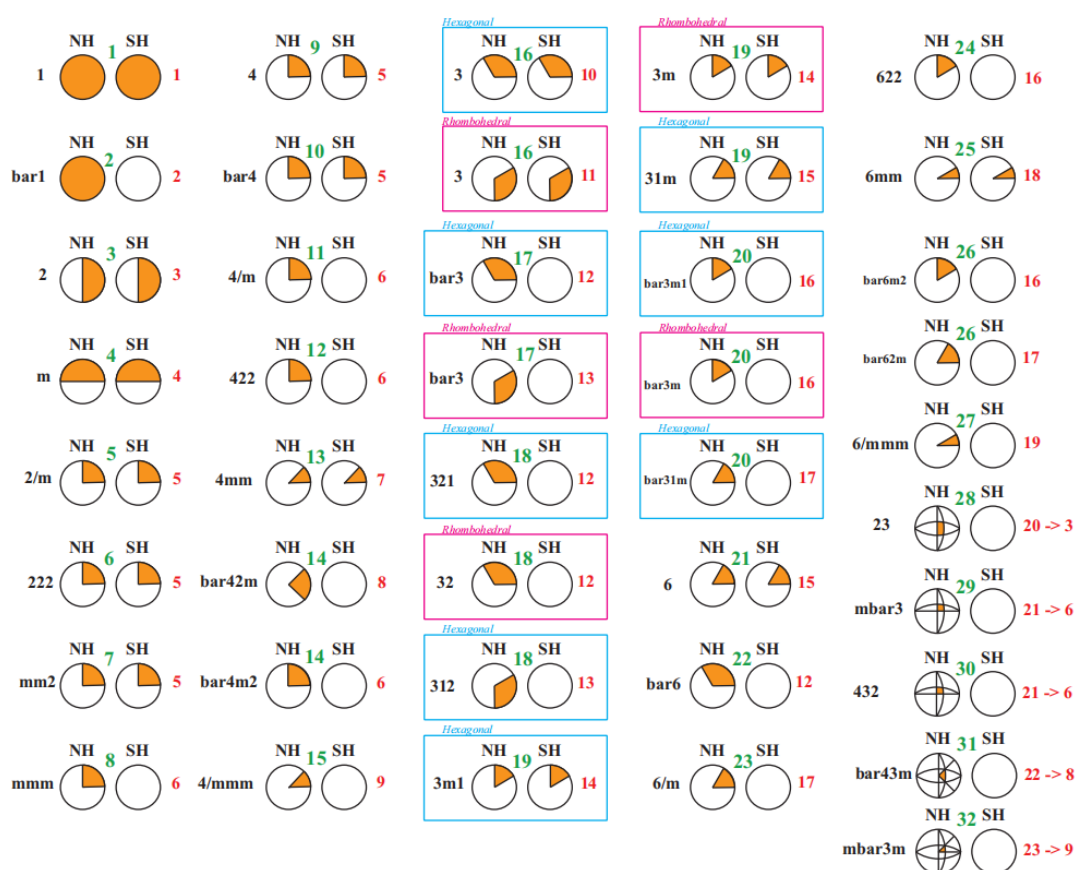
中子衍射：1、相比 VESTA 和 pymatgen，结果一致（pymatgen 衍射和测试部分见./pymatgen/analysis/diffraction 和./tests/analysis/diffraction 文件夹内容，更改测试结构需预先将测试结构存放在 pymatgen 默认结构路径，以便使用 get_structure 函数）；

电子衍射：1、后续待补充其他衍射强度计算方法，比如运动学和动力学，比如 material project 上列举的衍射强度计算方法（即 pymatgen）；2、目前使用的 vtk 文件格式仅用于正交体系，后续待补充非正交体系的 vtk 文件（paraview 导入 vtk 文件时遇近似于 0 的值易出错，需统一为 0）；

运动学菊池花样：1、更改投影屏幕中心易导致菊池线不平行，不更改投影屏幕中心易导致投影区域被限制，后续待改进选区球面投影方法

动力学菊池花样：1、参考 EMSOFT-5.0.0 的 EMEBSDmaster.f90 和 EMMCOpenCL.f90 文件，测试程序为 EMsoft-5.0.0-Win64 的 EMsoftWorkbench.exe，需要注意的有两点：一是 EMMCOpenCL.f90 的流程是将 EMMC.cl 的程序执行 number of electrons per workitem 次，EMMC.cl 执行 global work group size x global work group size 次不同随机数种子的蒙特卡罗模拟，若 total number of electrons to be considered 大于等于两者乘积，则重复执行，若小于两者乘积，则两者乘积为实际总入射电子数，所以一般依次设置为 21、10、20000，二是 EMsoftWorkbench.exe 上，trigonal 的 H/R 和 setting 的 1/2

指同一空间群下的不同设置，是 `spglib/spg_database.cpp` 的 `choice` 参数的第一个字符，参考 [Spglib dataset — Spglib v2.4.1.dev17+g9d86d26](#) 和 [空間群一覽 – Seto's Page \(yseto.net\)](#) 的 Axes, Origin; 2、EMSOFT 晶体空间群矩阵是基于 generator string 计算的，点群矩阵是选取空间群平移矩阵为 0 时的旋转矩阵（若空间群是非点式空间群，则选取相近的点式空间群的旋转矩阵），`spglib` 是基于 Hall number 获取空间群矩阵，但是并非所有非点式空间群均能找到相同 Axes, Origin 的点式空间群，大部分点式空间群是空或者 a、b、c，对应的非点式空间群是空或者 a、b、c 或其负，仅 25 是空、cab、bca，对应的非点式空间群的 Axes, Origin 超出空、cab、bca，那么问题在于同一空间群不同 Axes, Origin 下点群矩阵是否存在区别，后续有待研究，目前仅直接选取相近的点式空间群的第一个 Axes, Origin; 2、修正的 Lambert 投影方法为何产生菊池花样，原理尚有待研究；3、蒙特卡罗模拟依赖于随机数种子文件，后续待改进；4、基于 32 种点群的 19 种取样方案如下：



修改部分: `matrix_multiply(dmt, dsm, t_mat)`相乘顺序与 `rmt` 不一致, 为何?

测试 4: 三斜晶系, Au, 点群 `bar1`, 取样方案 2, 原子序数 79, 点式空间群 2

测试 6: 棱方晶系, Sb, 点群 `bar3m`, 取样方案 16, 原子序数 51, 空间群 166。

2024.06.24, 版本 0.0.1: 改进内容如下,

动力学菊池花样: 1、减少输入参数; 2、消除对 `hdf5` 的依赖;

编译与安装: 1、构建 `mac` 和 `linux` 版本的安装包, 相应的编译、安装步骤如下: