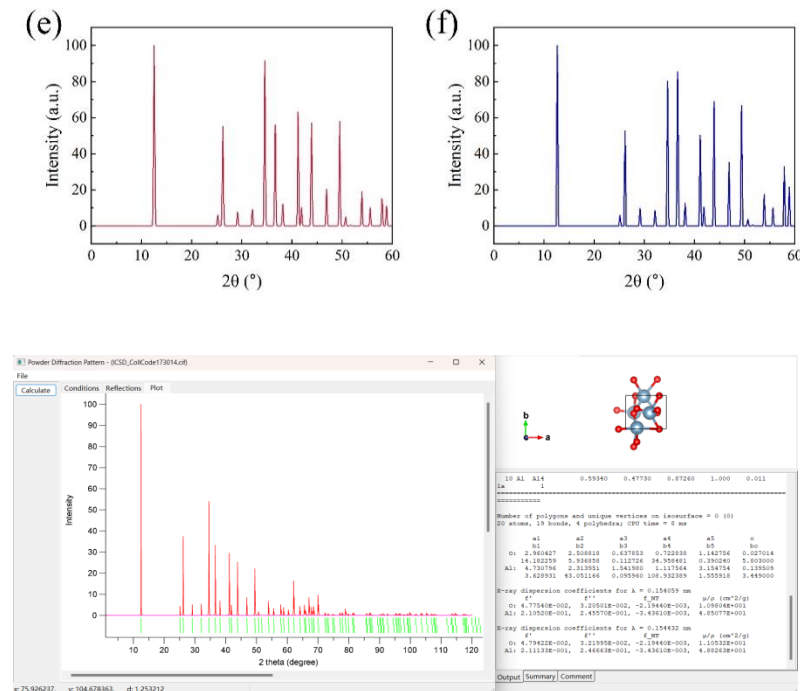


2024.06.24, 版本 0.0.0: 各部分注意点和改进点如下,

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](http://www.utimaterials.jp-minerals.org) UTILITIES ([jp-minerals.org](http://www.utimaterials.jp-minerals.org))) ;



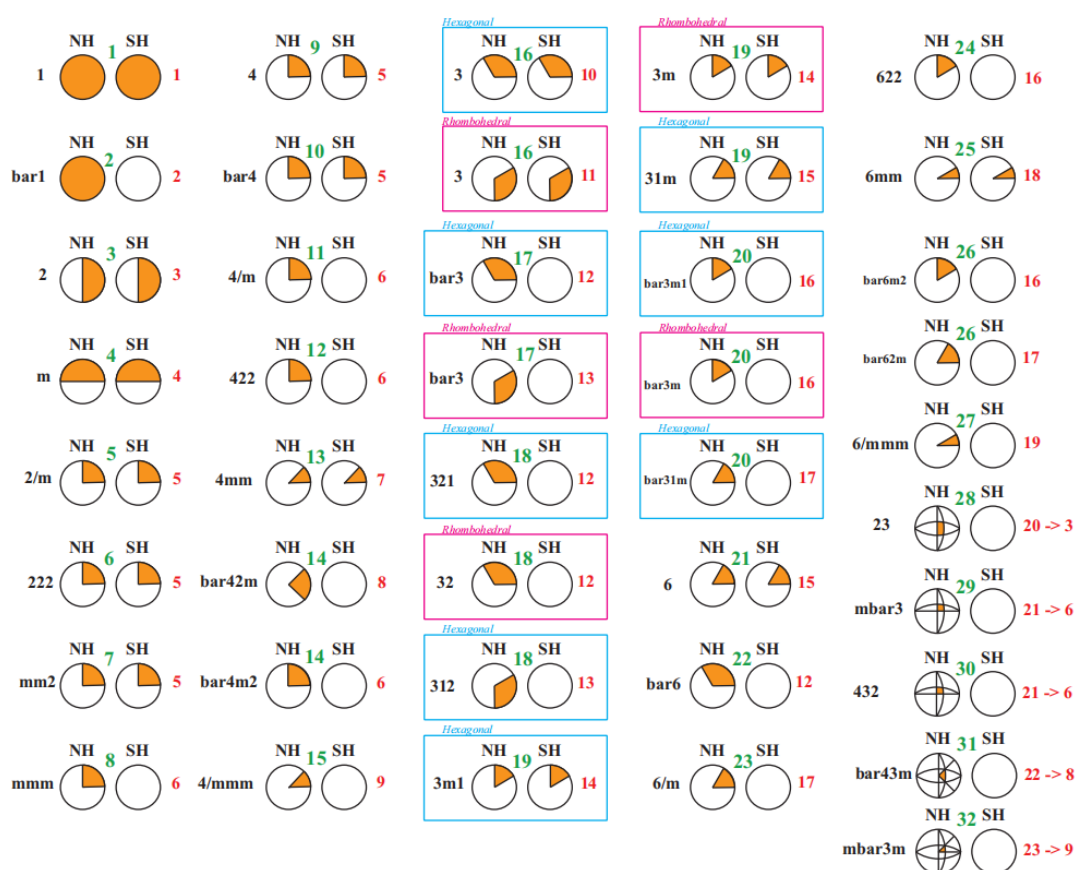
中子衍射: 1、相比 VESTA 和 pymatgen, 结果一致 (pymatgen 衍射和测试部分见./pymatgen/analysis/diffraction 和./tests/analysis/diffraction 文件夹内容, 更改测试结构需先将测试结构存放在 pymatgen 默认结构路径, 以便使用 get_structure 函数) ;

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: 电子衍射、运动学菊池衍射、动力学菊池衍射改进内容如下,

电子衍射: 1、由计算截面内衍射强度改为计算整个倒易球内衍射强度再输出截面内的 `.sed` 文件; 2、可一次性输出系列晶带轴的 `.sed` 文件

运动学菊池衍射: 1、将 `sed` 参量标签合并, 排除中间文件; 2、可一次性输出系列晶带轴的 `.png` 文件, 但是计算过程过慢, 后续待改进; 3、`5x5x5` 尺寸和 `10x10x10` 尺寸计算结果并无明显差别, 后续待测试。

动力学菊池衍射: 1、修改输入参数: 删除蒙特卡洛样品角度, 删除能量分区值, 将原来的 `20-19` 包含两边值改为包含前值不包含后值, 且 `int iE=floor((E-Emin)/Ebin);` `round` 改为 `floor`, 原来是 `20-19.5` 归 `20`、`19.5-19.0` 归 `19`, 改为均归为 `20`, 但最终结果没什么区别; 2、删除中间文件, 省去了 `hdf5`;

Mac 下的 `clang` 编译器部分 `c` 函数和库缺失导致的修改 (可通过 `g++ -c test.cpp -v` 查看标准库文件位置和内容): 1、`fabs(complex<double>)` 函数改为 `abs(complex<double>)` 函数; 2、`#include <complex.h>` 改为:

```
#include <complex>
```

```
#define lapack_complex_float std::complex<float>
```

```
#define lapack_complex_double std::complex<double>
```

```
#include "../include/lapacke.h"
```

3、`split_path` 形参的 `const char` 改为 `char`

编译与安装:

Win:

[Cygwin](#) 下载并保留 `setup-x86_64.exe`, 以便随时更新组件, 无需卸载重装;

安装流程中, 依次推荐 `Install from Internet`、`Use System Proxy Settings` 选项, 组件选择 `gdb` (The GNU Debugger)、`gcc-g++` (GNU Compiler Collection (C++))、`gcc-gfortran` (GNU Compiler Collection (Fortran))、`make` (The GNU version of the 'make' utility)、`binutils` (GNU assembler, linker, and similar utilities), 首次安装完毕注意配置环境变量。

视图(V)	已选择的	搜索(S)	清除(C)	保留(R)	最佳(B)
软件包	当前版本	操作	下载源代码?	类别	大小 描述
binutils	2.42-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	8.508K GNU assembler, linker, and similar utilities
gcc-fortran	11.4.0-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	10.744K GNU Compiler Collection (Fortran)
gcc-g++	11.4.0-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	18.186K GNU Compiler Collection (C++)
gdb	13.2-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	3.857K The GNU Debugger
make	4.4.1-2	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	584K The GNU version of the 'make' utility

在该编译环境下，执行以下步骤：

第一步：首先，[LAPACK — Linear Algebra PACKage \(netlib.org\)](https://netlib.org/lapack/lapack-3.12.0.tar.gz) 下载 lapack-3.12.0.tar.gz；

其次，解压进入 lapack-3.12.0 目录，输入以下命令行：

```
cp make.inc.example make.inc
```

```
make blaslib
```

```
make cblaslib
```

```
make lapacklib
```

```
make lapackelib
```

分别生成 lapack-3.12.0 目录下的静态链接库文件 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a（blas 提供基本的矩阵和向量运算，lapack 提供线性方程求解、二次规划、特征值分解等运算。cblas 是 blas 的 c 语言接口，lapacke 是 lapack 的 c 语言接口）。以及相关头文件在 lapack-3.12.0/CBLAS/include/和 lapack-3.12.0/LAPACKE/include/文件夹下；

最后，复制 lapack.h、lapacke.h、lapacke_mangling.h 头文件和 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a 分别到 src/include 和 src/lib 文件夹下。另外，复制 cygwin 安装目录下的 libgfortran.dll.a 在 src/lib 文件夹下，便于调用 fortran 库。

第二步：首先，[zlib Home Site](https://zlib.org/) 下载 zlib-1.3.1.tar.gz，

[LIBPNG: PNG reference library - Browse /libpng16/1.6.43 at SourceForge.net](https://sourceforge.net/projects/libpng/files/libpng16/1.6.43/libpng-1.6.43.tar.gz) 下载 libpng-1.6.43.tar.gz；

其次，解压进入 zlib-1.3.1，输入以下命令行：

```
./configure --prefix=[libpng_src_directory]
```

```
make && make install
```

解压进入 libpng-1.6.43，输入以下命令行：

```
./configure --prefix=[libpng_src_directory] LIBS=-L[libpng_src_directory]/lib CPPFLAGS=-I[libpng_src_directory]/include
```

```
make && make install
```

其中，libpng_src_directory 文件夹用于存放 zlib-1.3.1 和 libpng-1.6.43 编译结果，头文件存放在[libpng_src_directory]/include 和[libpng_src_directory]/include/libpng16，静态库文件存放在[libpng_src_directory]/lib，要求为绝对路径；

最后，复制 png.h、pngconf.h、pnglibconf.h、zconf.h、zlib.h 和 libpng16.a、libpng16.la、libz.a，注意：部分文件是软链接。

第三步：在 aavdp-x.x.x 目录下，输入以下命令行：

make

macOS:



版本为 macOS Big Sur 11.7.4，默认编译器如下：

```
zhangruifengdeMacBook-Pro:aavdp-macOS-v0.0.1 zrfcms$ gcc -v
Configured with: --prefix=/Library/Developer/CommandLineTools/usr --with-gxx-include-dir=/Library/Developer/CommandLineTools/SDKs/MacOSX.sdk/usr/include/c++/4.2.1
Apple clang version 13.0.0 (clang-1300.0.29.30)
Target: x86_64-apple-darwin20.6.0
Thread model: posix
InstalledDir: /Library/Developer/CommandLineTools/usr/bin
zhangruifengdeMacBook-Pro:aavdp-macOS-v0.0.1 zrfcms$ g++ -v
Configured with: --prefix=/Library/Developer/CommandLineTools/usr --with-gxx-include-dir=/Library/Developer/CommandLineTools/SDKs/MacOSX.sdk/usr/include/c++/4.2.1
Apple clang version 13.0.0 (clang-1300.0.29.30)
Target: x86_64-apple-darwin20.6.0
Thread model: posix
InstalledDir: /Library/Developer/CommandLineTools/usr/bin
zhangruifengdeMacBook-Pro:aavdp-macOS-v0.0.1 zrfcms$ make -v
GNU Make 3.81
Copyright (C) 2006 Free Software Foundation, Inc.
This is free software; see the source for copying conditions.
There is NO warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A
PARTICULAR PURPOSE.

This program built for i386-apple-darwin11.3.0
```

[Releases · fxcoudert/gfortran-for-macOS \(github.com\)](https://github.com/fxcoudert/gfortran-for-macOS/releases) 根据 macOS 版本下载 Gfortran 编译器，该 macOS 版本下载 gfortran-Intel-11.2-BigSur.dmg，双击安装，默认安装位置为/usr/local/gfortran（一般是安装 Homebrew 后通过 brew install gfortran，但是失败）。实际上 gfortran 和 lapacke 比较依赖 macOS 版本。

```
zhangruifengdeMacBook-Pro:aavdp-macOS-v0.0.1 zrfcms$ gfortran -v
使用内建 specs.
COLLECT_GCC=gfortran
COLLECT_LTO_WRAPPER=/usr/local/gfortran/libexec/gcc/x86_64-apple-darwin20/11.2.0/lto-wrapper
目标: x86_64-apple-darwin20
配置为: ../gcc-11.2.0/configure --prefix=/usr/local/gfortran --with-gmp=/Users/fx/devel/gcc/deps-static/x86_64 --enable-languages=c,c++,fortran,objc,obj-c++,d --build=x86_64-apple-darwin20 --disable-multilib --with-native-system-header-dir=/usr/include --with-sysroot=/Library/Developer/CommandLineTools/SDKs/MacOSX.sdk --enable-libphobos --without-bui
ld-config
线程模型: posix
Supported LTO compression algorithms: zlib
gcc 版本 11.2.0 (GCC)
```

第一步：首先，[LAPACK — Linear Algebra PACKage \(netlib.org\)](https://netlib.org/lapack/lapack-3.12.0.tar.gz) 下载 lapack-3.12.0.tar.gz；

其次，解压进入 lapack-3.12.0 目录，输入以下命令行：

```
cp make.inc.example make.inc
```

```
make blaslib
```

```
make cblaslib
```

```
make lapacklib
```

```
make lapackelib
```

分别生成 lapack-3.12.0 目录下的静态链接库文件 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a（blas 提供基本的矩阵和向量运算，lapack 提供线性方程求解、二次规划、特征值分解等运算。cblas 是 blas 的 c 语言接口，lapacke 是 lapack 的 c 语言接口）。以及相关头文件在 lapack-3.12.0/CBLAS/include/和 lapack-3.12.0/LAPACKE/include/文件夹下；

最后，复制 lapack.h、lapacke.h、lapacke_mangling.h 头文件和 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a 分别到 src/include 和 src/lib 文件夹下。/usr/local/gfortran 目录下无 libgfortran.dll.a，有 libgfortran.la 和 libgfortran.a，但无法链接，需在 Makefile 中 \$(obj) -o \$@后添加 -lgfortran。

第二步：首先，[zlib Home Site](#) 下载 zlib-1.3.1.tar.gz，

[LIBPNG: PNG reference library - Browse /libpng16/1.6.43 at SourceForge.net](#) 下载 libpng-1.6.43.tar.gz；

其次，解压进入 zlib-1.3.1，输入以下命令行：

```
./configure --prefix=[libpng_src_directory]
```

```
make && sudo make install
```

解压进入 libpng-1.6.43，输入以下命令行：

```
./configure --prefix=[libpng_src_directory] LIBS=-L[libpng_src_directory]/lib CPPFLAGS=-I[libpng_src_directory]/include
```

```
make && sudo make install
```

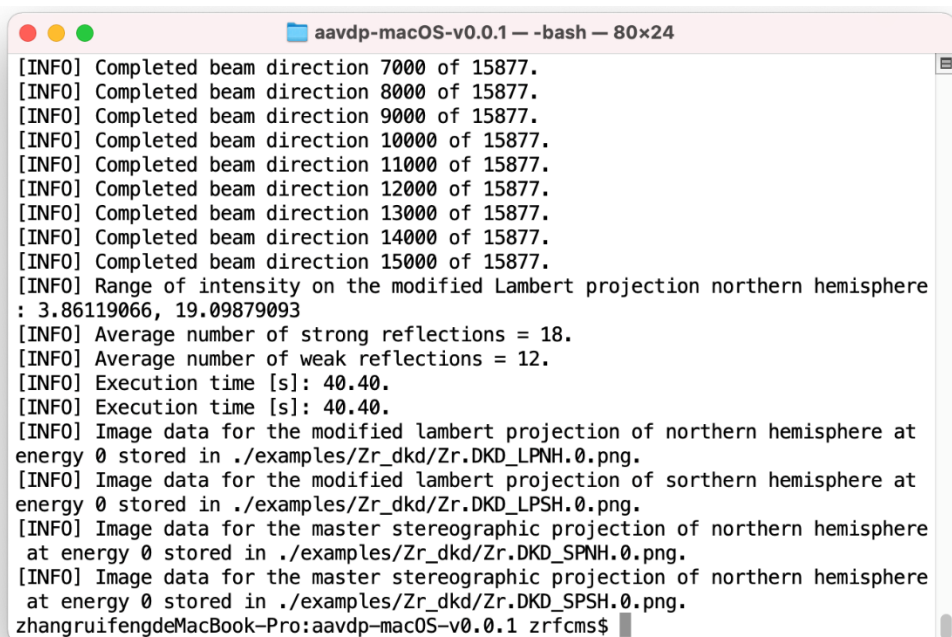
其中，libpng_src_directory 文件夹用于存放 zlib-1.3.1 和 libpng-1.6.43 编译结果，头文件存放在[libpng_src_directory]/include 和[libpng_src_directory]/include/libpng16，静态库文件存放在[libpng_src_directory]/lib，要求为绝对路径；

最后，复制 png.h、pngconf.h、pnglibconf.h、zconf.h、zlib.h 和 libpng16.a、libpng16.la、libz.a，注意：部分文件是软链接。

第三步：在 aavdp-x.x.x 目录下，输入以下命令行：

```
Make
```

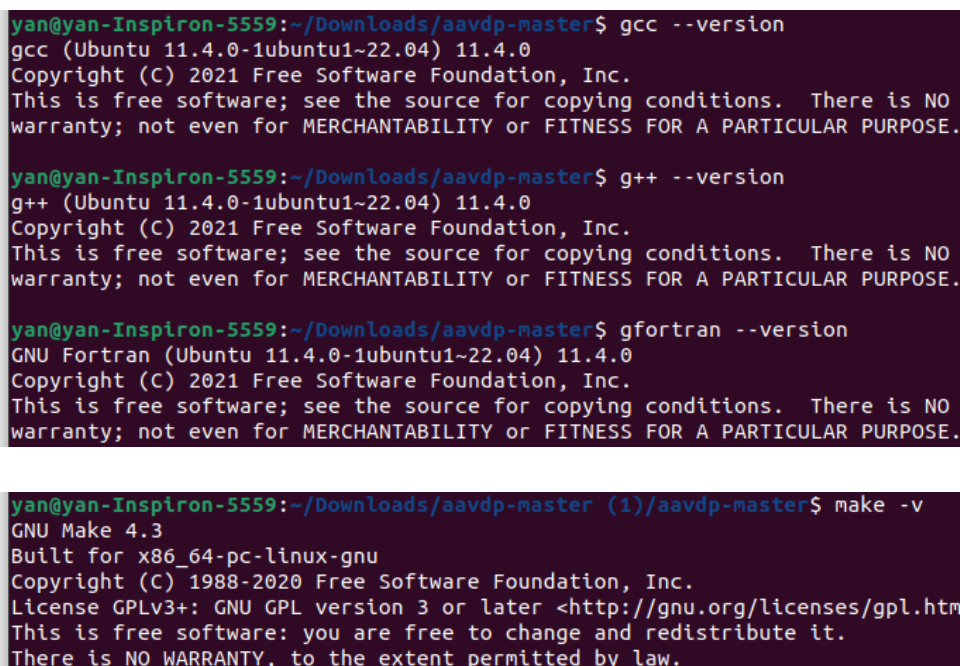

运行成功:



```
aavdp-macOS-v0.0.1 --bash -- 80x24
[INFO] Completed beam direction 7000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 8000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 9000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 10000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 11000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 12000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 13000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 14000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 15000 of 15877.
[INFO] Range of intensity on the modified Lambert projection northern hemisphere
: 3.86119066, 19.09879093
[INFO] Average number of strong reflections = 18.
[INFO] Average number of weak reflections = 12.
[INFO] Execution time [s]: 40.40.
[INFO] Execution time [s]: 40.40.
[INFO] Image data for the modified lambert projection of northern hemisphere at
energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_LPNH.0.png.
[INFO] Image data for the modified lambert projection of southern hemisphere at
energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_LPSH.0.png.
[INFO] Image data for the master stereographic projection of northern hemisphere
at energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_SPNH.0.png.
[INFO] Image data for the master stereographic projection of northern hemisphere
at energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_SPSH.0.png.
zhangruifengdeMacBook-Pro:aavdp-macOS-v0.0.1 zrfdms$
```

Linux:

通过 `sudo apt install gcc` 命令安装 gcc、g++、gfortran、make、gdb。



```
yan@yan-Inspiron-5559:~/Downloads/aavdp-master$ gcc --version
gcc (Ubuntu 11.4.0-1ubuntu1~22.04) 11.4.0
Copyright (C) 2021 Free Software Foundation, Inc.
This is free software; see the source for copying conditions. There is NO
warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.

yan@yan-Inspiron-5559:~/Downloads/aavdp-master$ g++ --version
g++ (Ubuntu 11.4.0-1ubuntu1~22.04) 11.4.0
Copyright (C) 2021 Free Software Foundation, Inc.
This is free software; see the source for copying conditions. There is NO
warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.

yan@yan-Inspiron-5559:~/Downloads/aavdp-master$ gfortran --version
GNU Fortran (Ubuntu 11.4.0-1ubuntu1~22.04) 11.4.0
Copyright (C) 2021 Free Software Foundation, Inc.
This is free software; see the source for copying conditions. There is NO
warranty; not even for MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE.

yan@yan-Inspiron-5559:~/Downloads/aavdp-master (1)/aavdp-master$ make -v
GNU Make 4.3
Built for x86_64-pc-linux-gnu
Copyright (C) 1988-2020 Free Software Foundation, Inc.
License GPLv3+: GNU GPL version 3 or later <http://gnu.org/licenses/gpl.html>
This is free software: you are free to change and redistribute it.
There is NO WARRANTY, to the extent permitted by law.
```

第一步: 首先, [LAPACK — Linear Algebra PACKage \(netlib.org\)](https://netlib.org/lapack/) 下载 lapack-3.12.0.tar.gz;

其次, 解压进入 lapack-3.12.0 目录, 输入以下命令行:

`cp make.inc.example make.inc`

```
make blaslib
```

```
make cblaslib
```

```
make lapacklib
```

```
make lapackelib
```

分别生成 lapack-3.12.0 目录下的静态链接库文件 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a（blas 提供基本的矩阵和向量运算，lapack 提供线性方程求解、二次规划、特征值分解等运算。cblas 是 blas 的 c 语言接口，lapacke 是 lapack 的 c 语言接口）。以及相关头文件在 lapack-3.12.0/CBLAS/include/和 lapack-3.12.0/LAPACKE/include/文件夹下；

最后，复制 lapack.h、lapacke.h、lapacke_mangling.h 头文件和 librefblas.a、libcblas.a、liblapack.a、liblapacke.a 分别到 src/include 和 src/lib 文件夹下。

第二步：首先，[zlib Home Site](#) 下载 zlib-1.3.1.tar.gz，

[LIBPNG: PNG reference library - Browse /libpng16/1.6.43 at SourceForge.net](#) 下载

libpng-1.6.43.tar.gz；

其次，解压进入 zlib-1.3.1，输入以下命令行：

```
./configure --prefix=[libpng_src_directory]
```

```
make && sudo make install
```

解压进入 libpng-1.6.43，输入以下命令行：

```
./configure --prefix=[libpng_src_directory] LIBS=-L[libpng_src_directory]/lib CPPFLAGS=-I[libpng_src_directory]/include
```

```
make && sudo make install
```

其中，libpng_src_directory 文件夹用于存放 zlib-1.3.1 和 libpng-1.6.43 编译结果，头文件存放在[libpng_src_directory]/include 和[libpng_src_directory]/include/libpng16，静态库文件存放在[libpng_src_directory]/lib，要求为绝对路径（libpng_src_directory 要求在 /usr/local 下，不然导致编译 libpng-1.6.43 无法识别到 zlib-1.3.1 已安装）；

最后，复制 png.h、pngconf.h、pnglibconf.h、zconf.h、zlib.h 和 libpng16.a、libpng16.la、libz.a，注意：部分文件是软链接。

第三步：在 aavdp-x.x.x 目录下，输入以下命令行：

```
make
```

运行成功


```
yan@yan-Inspiron-5559: ~/Downloads/aavdp-master (1)/aavd...
[INFO] Completed beam direction 7000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 8000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 9000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 10000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 11000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 12000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 13000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 14000 of 15877.
[INFO] Completed beam direction 15000 of 15877.
[INFO] Range of intensity on the modified Lambert projection northern hemisphere
: 3.86119066, 19.09879093
[INFO] Average number of strong reflections = 18.
[INFO] Average number of weak reflections = 12.
[INFO] Execution time [s]: 42.94.
[INFO] Execution time [s]: 42.95.
[INFO] Image data for the modified lambert projection of northern hemisphere at
energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_LPNH.0.png.
[INFO] Image data for the modified lambert projection of southern hemisphere at
energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_LPSH.0.png.
[INFO] Image data for the master stereographic projection of northern hemisphere
at energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_SPNH.0.png.
[INFO] Image data for the master stereographic projection of southern hemisphere
at energy 0 stored in ./examples/Zr_dkd/Zr.DKD_SPSH.0.png.
yan@yan-Inspiron-5559:~/Downloads/aavdp-master (1)/aavdp-master$
```

2024.07.01, 版本 0.0.2: 1、原位绘图实现如下:

尝试 1: FLTK 库在 windows 上只能用 mingw 版本的编译器, 以及其他的跨平台编译问题;

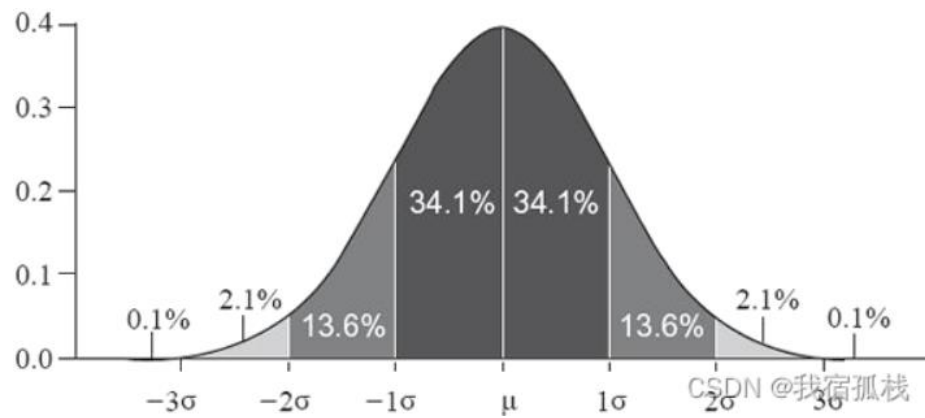
尝试 2: matplotlib-cpp 需要安装特定版本的 python (需安装 matplotlib 及相关的库), 无法打包;

视图(V)	已选择的	搜索(S)	清除(C)	保留(R)	最佳(B)	同步(S)	源
软件包	当前版本	操作	下载源代码?	类别	大小	描述	
binutils	2.42-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	8.508k	GNU assembler, linker, and similar utilities	
gcc-fortran	11.4.0-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	10.744k	GNU Compiler Collection (Fortran)	
gcc-g++	11.4.0-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	18.189k	GNU Compiler Collection (C++)	
gdb	13.2-1	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	3.857k	The GNU Debugger	
make	4.4.1-2	保留	<input type="checkbox"/>	Devel	584k	The GNU version of the 'make' utility	
python-matplotlib-debuginfo	3.5.1-1	保留	<input type="checkbox"/>	Debug	3.552k	Debug info for python-matplotlib	
python3	3.6.15-1	保留	<input type="checkbox"/>	Interpreters, Python	5.635k	Python language interpreter	
python36-dev	3.6.15-1	保留	<input type="checkbox"/>	Interpreters, Python	165k	Python language interpreter	
python36-matplotlib	3.3.3-1	保留	<input type="checkbox"/>	Python	7.176k	Python plotting package	
python38	3.8.16-1	保留	<input type="checkbox"/>	Interpreters, Python	6.104k	Python language interpreter	
python38-dev	3.8.16-1	保留	<input type="checkbox"/>	Interpreters, Python	180k	Python language interpreter	
python38-matplotlib	3.5.1-1	保留	<input type="checkbox"/>	Python	5.003k	Python plotting package	
python39-dev	3.9.16-1	保留	<input type="checkbox"/>	Interpreters, Python	193k	Python language interpreter	
python39-matplotlib	3.5.1-1	保留	<input type="checkbox"/>	Python	5.991k	Python plotting package	

尝试 3: 依赖已有的 libpng 库自行设计绘制简易的折线图 and 散点图, 优势是无需增加依赖库和编译问题, 但无法显示字符; 确定采用该方案。

2、xrd 衍射峰曲线实现高斯分布、洛伦兹分布和伪 Voigt 分布, 具体实现采用单一衍射线数组对数学分布数组的一维 same 卷积, 需要注意的是高斯分布函数中 σ 参数不直接对应半高宽

$$FWHM = 2\sqrt{2 \ln 2} = 2.3548\sigma$$



3、孪晶和位错环的构建：（1）fcc 和 bcc 孪晶构建见例子中的 Ni_twin_sed 和 Fe_twin_sed；（2）位错环构建采用 atomsk 命令行，参考 [Atomsk - Documentation \(univ-lille.fr\)](http://atomsk.univ-lille.fr)

待改进的内容：1、自动标定晶面指数；2、xrd、sed 增加公式种类；3、sed 取样和映射方案混合搭配。