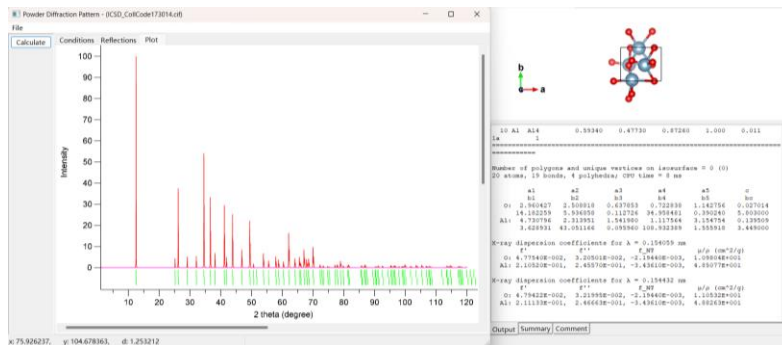
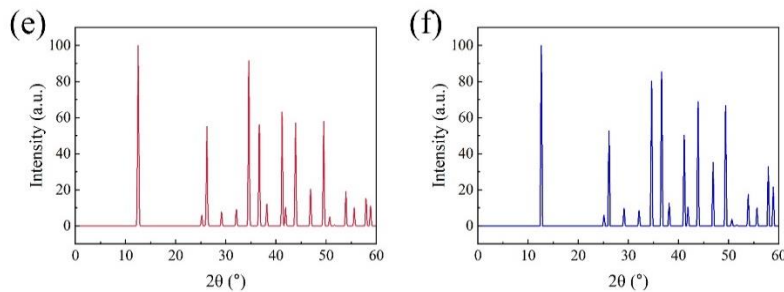


2024.06.24, 版本 0.0.0: 各部分注意点和改进点如下,

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://www.crystallography.net/utilities/jp-minerals.org));



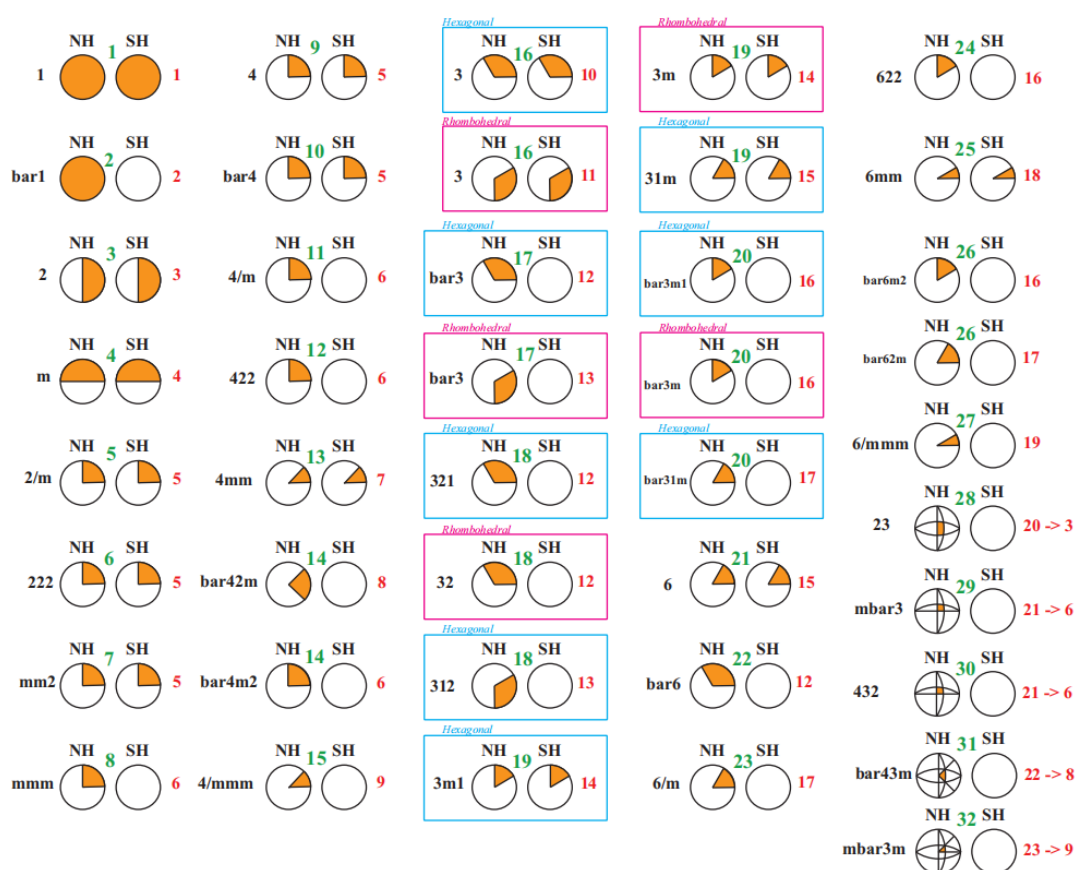
中子衍射: 1、相比 VESTA 和 pymatgen, 结果一致 (pymatgen 衍射和测试部分见./pymatgen/analysis/diffraction 和./tests/analysis/diffraction 文件夹内容, 更改测试结构需先将测试结构存放在 pymatgen 默认结构路径, 以便使用 get_structure 函数);

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`;

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: