

***LANDYNE* 蓝带软件**

使用手册

晶体结构显示和分析工具

蓝带软件 2011-2024 ©

版权所有



目录

1. 引言.....	3
2. 应用范围与特点.....	3
2.1 可视界面设计.....	3
2.2 应用范围与特点.....	3
3. 方法介绍.....	5
3.1 准备新的结构文件.....	5
3.2 晶体结构数据库.....	7
3.3 使用简介.....	8
4. 应用举例.....	8
5. 安装指南.....	11
5.1 电脑的设置要求.....	12
5.2 软件的安装步骤.....	12
5.3 软件的使用许可与反馈.....	12
6. 参考文献.....	12

1. 引言

Landyne 套件是由李兴中博士开发的软件包，可用于电子衍射模拟和晶体学分析。该软件包可以用作研究工具和教具。随着软件组件和用户的增长，对结构显示和分析工具的需求变得显而易见。可以在互联网上找到用于各种级别的结构构建，显示和分析的软件。其中一些是具有多用途和高级图形的复杂软件，例如 文献[CMX]。其他的仅仅是显示晶体结构的程序，而没有很多分析晶体结构的功能，例如：文献[FCV]。开发 SVAT 的动机是提供结构显示工具，并同时充当 Landyne 套件的分析工具。

SVAT 于 2011 年开发出来，用于晶体结构的交互式三维显示和作为分析合金及金属间结构的快速工具。在后来多年应用中更多功能逐渐集成到 SVAT 中，以扩展结构显示和分析。关于 SVAT4 的论文发表在 J. Applied Crystallography[xzli, 2020]。当前版本是 SVAT5，除了基本功能（即单位晶胞中晶体结构的交互式三维显示，包括化学键和磁矩）外，还有其他功能可用于（i）用户选择的[uvw]方向或层上的投影（ii）通过定义中心原子和球形范围的半径来定义局部结构（或多面体簇）包括用于计算键长/角度和化学成分检查的工具。可以保存晶胞中原子的完整列表，该列表可用于修改结构。该结构可以旋转或摆动的动画模式显示。一个重要的功能是可以将用户在结构上的工作保存到文件中，然后可以重新加载该文件以便下次快速显示，或者可以继续完成未完成的工作。可以将结构的显示另存为 JPEG 和 TIFF 图像格式的文件。功能的更多详细信息如下所述。

2. 应用范围与特点

2.1 可视界面设计

SVAT5 的图形用户设计包括下拉菜单、菜单栏、显示面板和多个操作面板。下拉菜单提供所有操作面板，而菜单栏列出了经常使用的面板。显示面板和控制面板始终在屏幕上，而其他操作面板可以打开和关闭，如图 1 和图 2 所示。

2.2 应用范围与特点

软件作为可视化工具概述如下，

- 鼠标左键沿 x-y 轴旋转，鼠标右键沿 z 轴旋转，鼠标滚轮用于晶格放大/缩小。缩放选项也可用于没有鼠标滚轮的笔记本电脑。
- 晶体结构的任意方向可以通过鼠标（步骤 1° ）和箭头键（步骤 0.1° ）以交互方式显示。
- 可首先在投影模式下设置沿 [uvw] 的晶体结构显示，然后重新选择 3D 模式。
- 原子的大小和颜色在内置数据中定义或由用户修改。

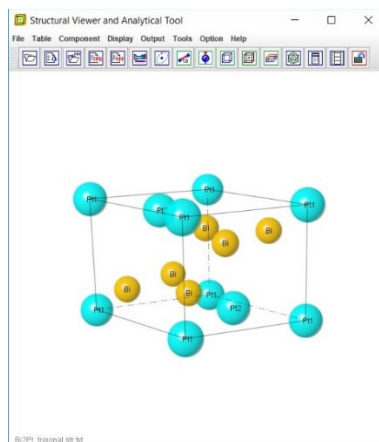


图 1. SVAT5 的图像界面与 Bi_2Pt 结构。

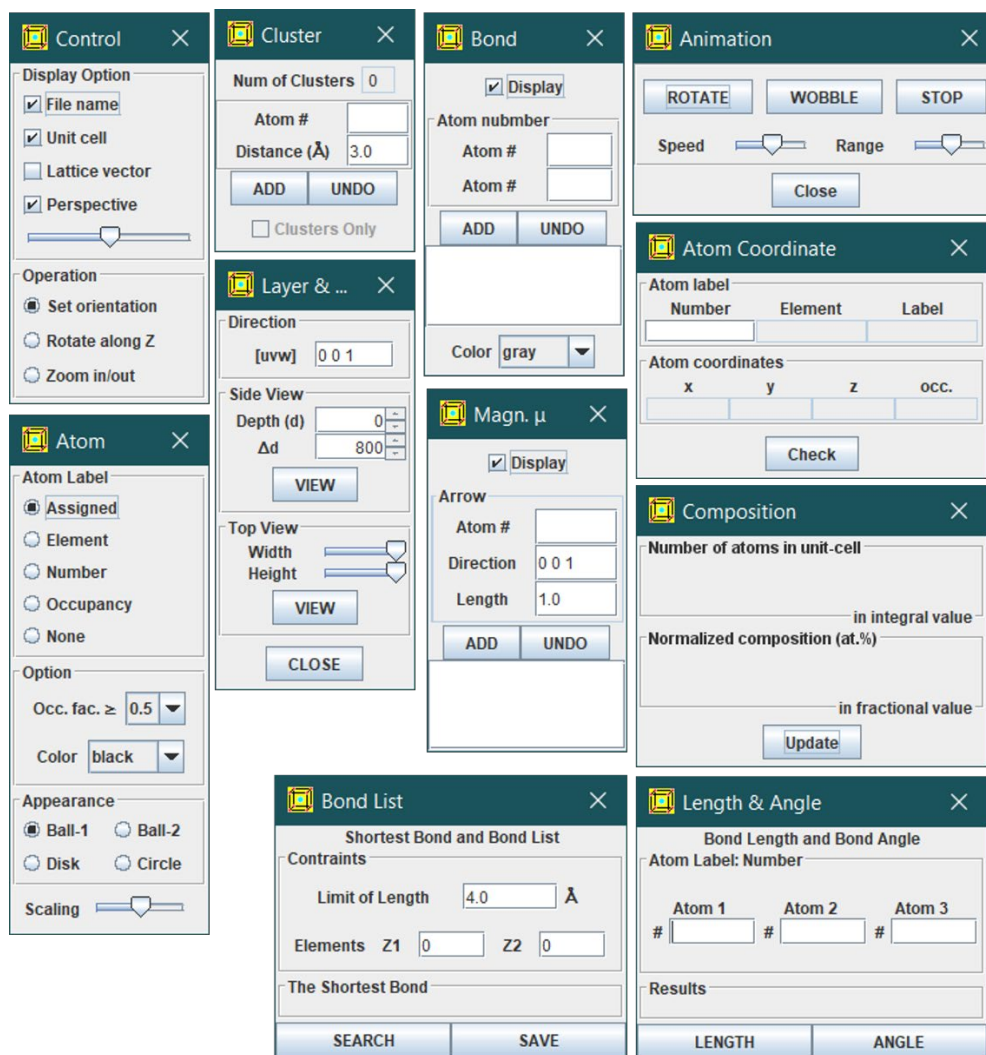


图 2. SVAT5 中的所有操作面板。

- 原子的大小都作为整体可以一起扩大或缩小。
- 原子可显示为圆或圆盘或两类固体球，选择前两个选项用于快速显示结构。
- 背景可以选择白色或黑色。
- 六边类结构可用传统单胞和对称单元显示，此外，菱形结构可用菱形原始单元显示。
- 在结构中用户可添加原子之间的键或原子的磁距。
- 动画可以设置为旋转或振荡模式。
- 结构显示同时，可选文件名、单位单元格、晶格矢量和不同程度的透视视图。可以在文件名对话框中调整位置、字体大小和颜色。
- 晶体结构的调整，可以绕任何轴旋转，也可以绕屏幕法线旋转。
- 晶体结构的大小可调整用于三维显示以及结构投影和结构层显示。
- 为教学晶体学提供只有点阵的选项。

作为分析工具的功能概述如下：

- 每个原子可以标记上原有的标签或元素符号，或数字，或占位因子（如果小于 1）或无标记。其中数字标记可用于构建结合键和原子簇团。
- 显示占位因子为 1 的原子和占位因子小于 1 的原子。
- 可通过定义中心原子和距离来搜索和构建原子簇团的坐标。
- 显示沿 $[uvw]$ 结构投影或原子片层结构。
- 可以保存单元单元中的原子的完整列表。这个功能可用于结构修改。
- 可以计算单胞的化学成分。这个功能可验证结构是否正确。
- 搜索晶体结构中最短的键和键与列表。
- 计算两个键之间的键距离和角度。
- 比较两个 SVAT5 中的两个晶体结构。

输入和输出的功能概述如下：

- 提供了可用于准备晶体结构文件的标准模板。
- 提供了元素周期表。包括计算和经验测量原子半径的数据集。
- 提供了空间群标记符号表。
- 提供了可选择的区域可用于输出。
- 输出显示的格式可以选择 .gif 或 .jpg 或.tif。

3. 方法介绍

3.1 准备新的结构文件

如上所述，SVAT5 提供了一个用于准备新的晶体文件的模板，如图 3 所示。这个模板即可用于晶体数据中手动输入，也可以从 Landyne 软件套件以前的数据或晶体信息文件转换。Landyne 软件套件中的组件中使用相同的输入文件格式。

New Crystal Structure File

Description
New crystal structure

Space group
☒ The standard settings (1~230) ☐ The alternative settings (1~74)
 Number 1~230 Symbol ? Origin ▼

Lattice parameters
 a = (Å) b = (Å) c = (Å) α = (°) β = (°) γ = (°)

Coordinates of Atoms

atom	elem #	x	y	z	occ.
		0.0	0.0	0.0	1.0

Add Remove Clear View

Number of atom in the list: 0 Global isotropic temperature factor 0.0

Notes
References etc.

New Load Save Close

图 3. 用于准备晶体结构文件的模板。

From Alternative to Standard Setting

Description
new crystal structure

Triclinic, monoclinic and orthorhombic systems
 Space group number 3 Alternative symbols P 1 2 1 ▼

Lattice parameters
 a = (Å) b = (Å) c = (Å) α = 90.0 (°) β = (°) γ = 90.0 (°)

Coordinates of Atoms

atom	elem #	x	y	z	occ.
		0.0	0.0	0.0	1.0

Add Remove Clear View

Number of atom in the list: 0 Global isotropic temperature factor 0.0

Notes
References etc.

New Load Transform Back

图 4. 用于在单斜晶系和正交晶系中使用非标准空间群的晶体结构文件的模板。

该模板嵌入了在国际晶体学表中的 230 个空间群与相应的赫尔曼-莫金 Hermann-Mauguin 记号。需要提醒的是，在单轴系统中将只使用 b 唯一轴。两个原点选项可接受为输入参数，但选项 2 将转换为选项 1。如果使用了三斜系统、单斜系统和正交系统中的非标准晶胞空间群的数据文件，请单击非标准空间群设置（1~74）。图 4 显示了一种用于将非标准空间群转换为标准空间群的工具。

除了上述结构文件之外，还提供了第二种类型的输入文件。该文件包含用户之前的有关结构的调整的信息。如果在加载在同一晶体后，再加载第二种类型的工作文件，则可瞬间完成之前的有关结构的调整。

3.2 晶体结构数据库

Landyne 软件套件提供了一组晶体结构，部分结构数据来自 Marc De Graef 和 Michael E McHenry 撰写的“材料结构：晶体学，衍射和对称性简介”附录 1 中的列表（第 2 版版，剑桥大学出版社 2012 年），另一部分来自研究工作所涉及的晶体相。如图 5 所示，元素周期表，提供计算出的和凭经验测量的原子半径数据[WAR]。原子半径和原子显示颜色都可以自定义，以可视化晶体结构。

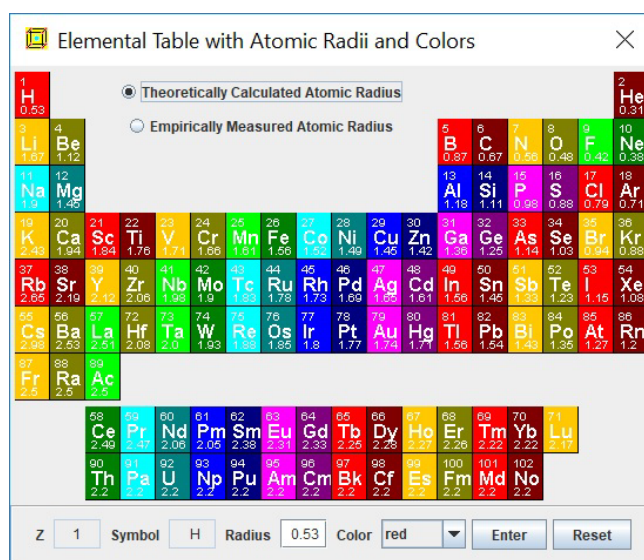


图 5. 元素周期表，其中包含理论计算的和经验测量的原子半径[3]。
原子半径和原子显示颜色均可自定义。

在这里，我们列出了晶体结构的常见资源。

- Pearson' s Handbook, Crystallographic data for intermetallic phases. Ed. P. Villars. ASM
- ICDD - International Centre for Diffraction Data.
- Appendix 1. Crystal Structure Descriptions in Structure of Material by M. De Graef and M.E. McHenry [TSM].

- Library of Crystallographic prototypes, part 1. Eds. M.J. Mehl *et al.*, part2. Eds. D Hicks, *et al.* [ECP].

3.3 使用简介

SVAT5 的用法是简单明了的。例如，可以在三维视图中以可调的透视常数显示晶体结构。利用原子标签和原子外观的各种选项中的原子数字标签，可用于添加化学键和磁矩。在此，我们为初学者提供一些提示，以帮助他们熟悉 SAVT4 的用法。

- 在结构模板中，大多数 CIF 形式的晶体结构文件可以直接上载和编辑。某些 CIF 文件可能无法完全传输，因此需要手动编辑。
- 新的数据文件准备好后，即使是为电子衍射模拟，也要在三维视图中核对。
- 在设置原子之间的键之前，需要选择原子“数字”标签。
- 在原子上设置磁矩之前，需要选择原子“数字”标签作为。
- 如果要保存当前工作，请选择“保存（当前工作）到二进制文件”。
- 您需要先加载晶体结构，然后重新加载相同晶体结构（先前的工作）。
- 原子半径和原子显示的颜色可以由用户针对当前工作进行编辑，也可以保存到工作文件中并作为自定义数据集重新加载以用于以后的工作。
- 保存显示之前，您可以使用 ROI 和 TIFF 定义关注区域。
- 为了沿[uvw]查看结构，请首先在“层和投影”中选择[uvw]，然后重新选择“结构”。您可以打开或关闭透视系数。
- 使用按键盘中的箭头微调晶体结构的方向时，确保鼠标箭头在显示面板上。
- 第二类固体球的原子外观比第一类固体球透明些。
- 具有 P1 空间组的晶胞中原子的完整列表。如果添加或删除原子，则需要调整表中相应的原子数。
- 如果要保存 TIFF 文件（显示为.tif），则需要确保 Java 环境中的 JAI（jai_codec.jar 和 jai_core.jar）例如 `java \ jre1.8.0_221 \ lib \ ext \`。

4. 应用举例

下面列出了一些示例，这些示例与作者以前的研究工作有关。

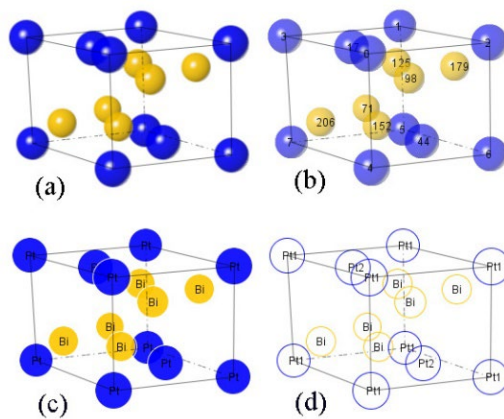


图 6. 具有不同外观的 Bi_2Pt 的结构。(a) 实心球，(b) 透明球，(c) 圆盘和 (d) 圆中的原子以及 (a) 无标记，(b) 数字，(c) 元素和 (d) 原标签。

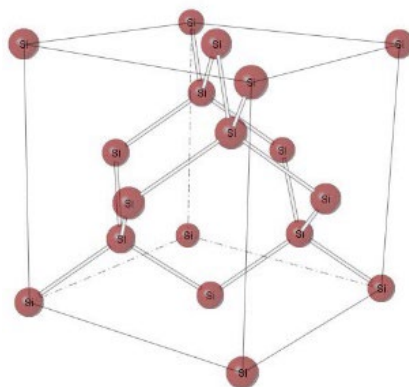


图 7. 带有化学键的硅结构。

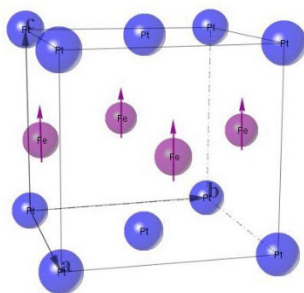


图 8. FePt L_{10} 相的结构，在 Fe 原子上标有磁矩。

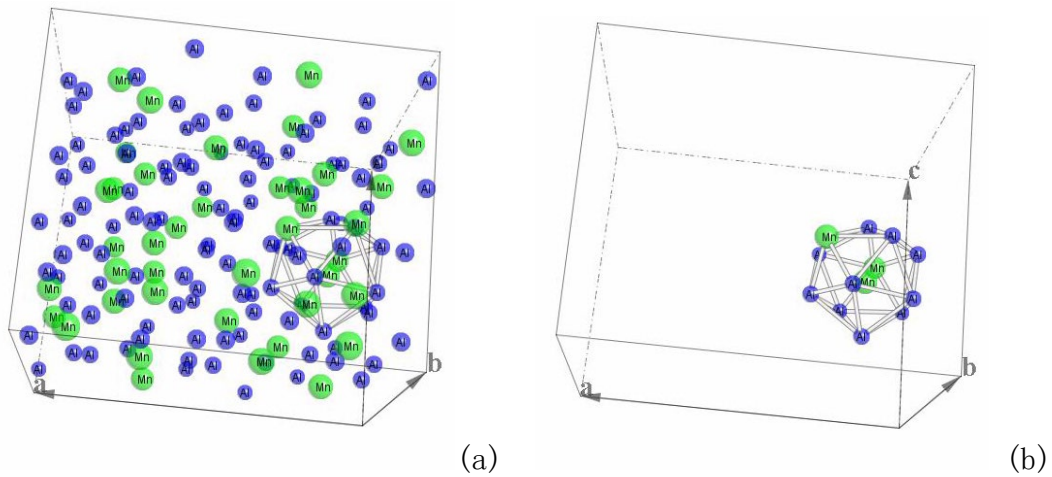


图 9. (a) 结构中显示了 Al_3Mn 相的结构以及 (b) 多面体簇。这是 Al-Mn 十边形准晶体的晶体近似相。

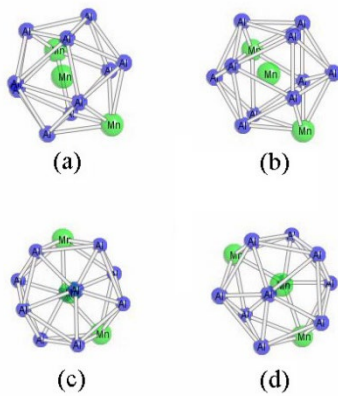


图 10. Al_3Mn 相结构中的四个多面体簇。

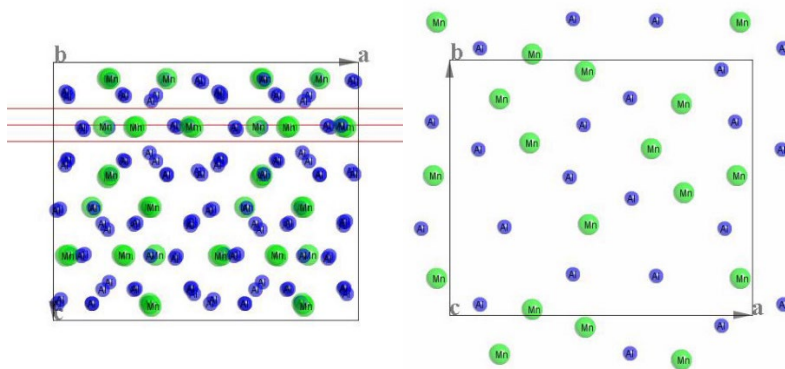


图 11. Al_3Mn 相的结构投影和层的结构。

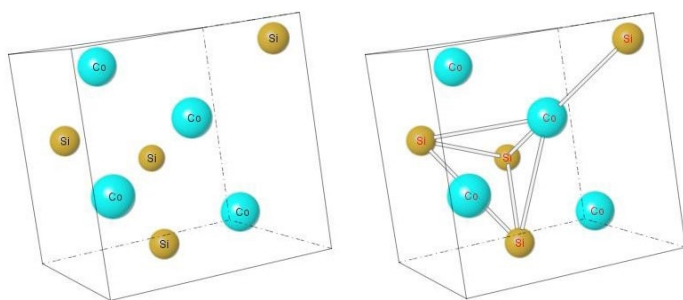


图 12. 使用原子坐标 I 中的 CoSi B20 相的结构。

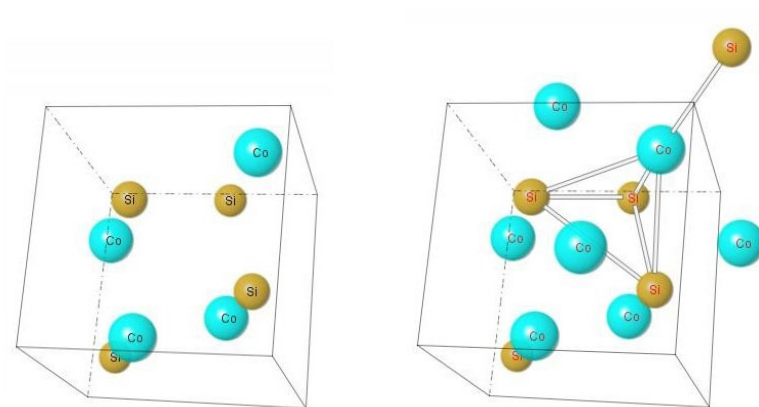


图 13. 使用原子坐标 II 中的 CoSi B20 相的结构。

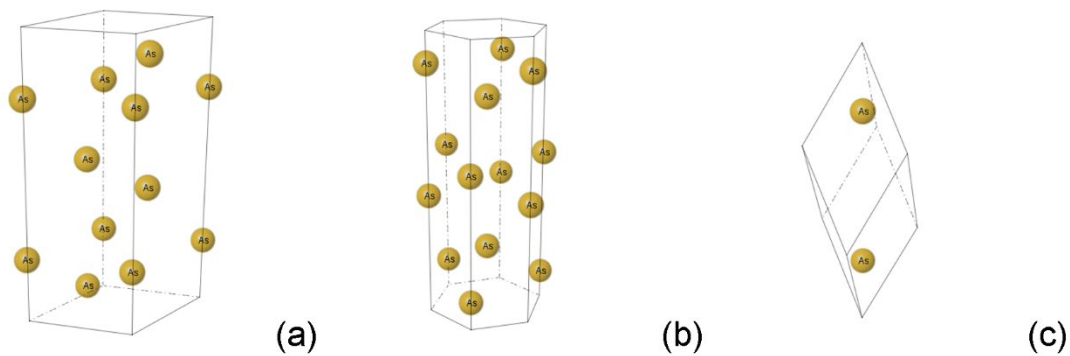


图 14. α -As 相的结构，(a) 常规单胞，(b) 对称胞和 (c) 菱形胞。

5. 安装指南

5.1 电脑的设置要求

在使用 LANDYNE 之前，必须在电脑中安装 Java 虚拟机（即 J2RE）才能运行 SVAT5。三维视觉是使用立体几何计算和 Java2D 函数生成的，因此不需要 Java3D 库。TIFF 文件需要 Java Advance Image，将 jai_codec.jar 和 jai_core.jar 复制到例如 Java \ jre \ lib \ ext \ 折叠。jai_codec.jar 和 jai_core.jar 可在万维网中下载，例如，<https://www.unl.edu/ncmn-enif/xzli/download>

5.2 软件的安装步骤

可执行程序以及用于测试的数据文件，包括此文件可通过压缩格式（landyne5.7z）在
<https://www.unl.edu/ncmn-enif/xzli/computer-programs>

<https://landyne.com>

上获得。在用户定义的目录中解压缩 landyne5.7z c:\ landyne5 \并执行 launcher.exe。

5.3 软件的使用许可与反馈

SVAT5 有两种工作模式，演示与评估模式和正常使用模式。该软件可以在演示模式下完全运行，但仅限于演示输入文件。

LANDYNE（jlandyne@gmail.com）提供短期和永久许可。欢迎提出建议和意见，有利于软件普及与发展。

6. 参考文献

Li, X.Z., SVAT4 – a computer program for crystal structure visualization and analysis, J. Appl. Cryst. 53(2020) 848-853.

CrystalMaker X [CMX], <http://crystallmaker.com/crystallmaker/>

Flash: 3D Crystal Viewer [FCV], <http://www.dawgsdk.org/crystal/index.en>

Wikipedia: Atomic radius [WAR], http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_radius

The Structure of Materials [TSM], <http://som.web.cmu.edu/frames.html>

Encyclopedia of Crystallographic prototypes [ECP], <http://aflowlib.org/CrystalDatabase/>