

说明文档

一、简介

程序名称: Abinito Studio

版本号: 1.0.0

运行环境: Windows 10、Python3.x

依赖库: numpy、PyQt5、matplotlib、traits、mayavi、pyxtal、jumpssh

版本参考: numpy = 1.19.4

PyQt5 = 5.10

matplotlib = 3.2.2

traits = 4.6.0

mayavi = 4.7.1

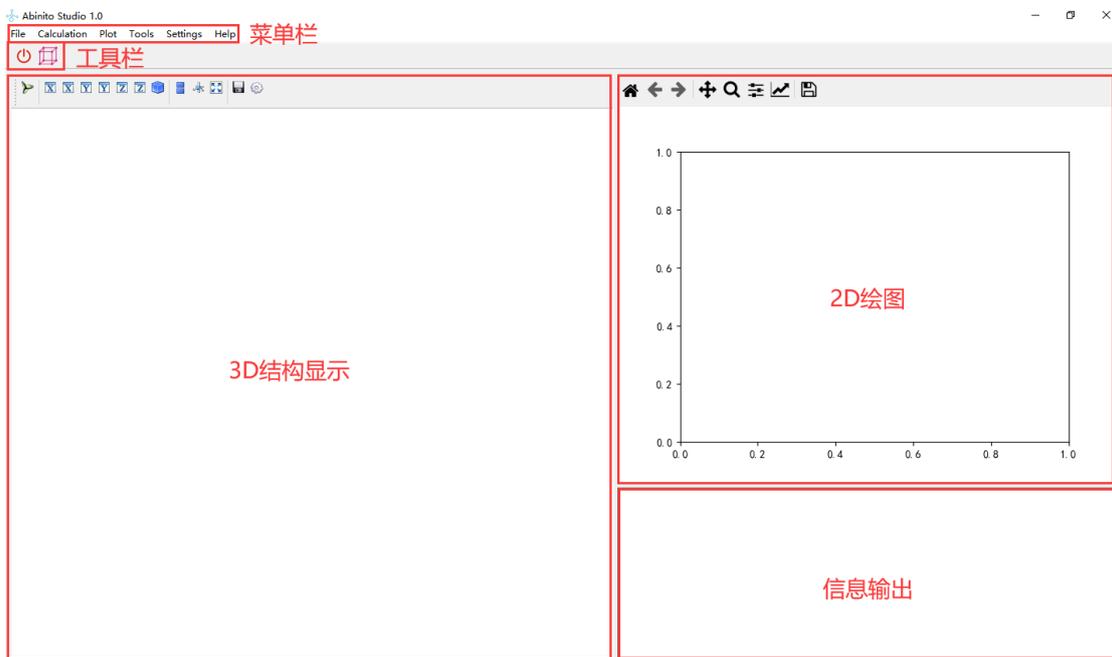
pyxtal = 0.3.0

jumpssh = 1.6.5

pip 安装命令: `pip install PyQt5==5.10 -i https://mirrors.aliyun.com/pypi/simple`

运行方式: 运行 appMain.py 文件

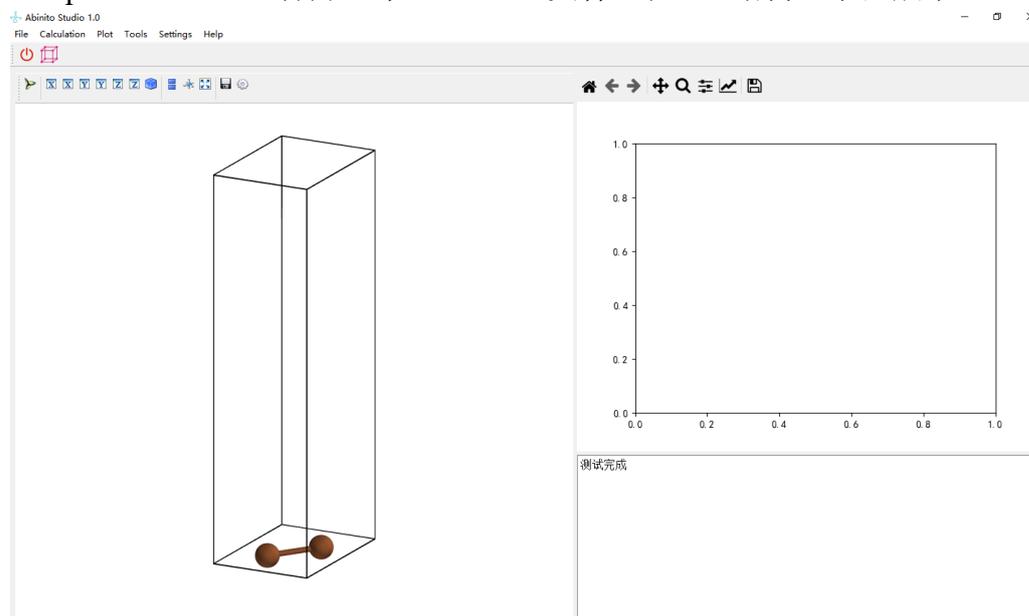
程序界面:



二、 使用：

1. File

【Open POSCAR】 打开一个 POSCAR 文件，在 3D 结构显示区展示。



【Close】 退出程序。

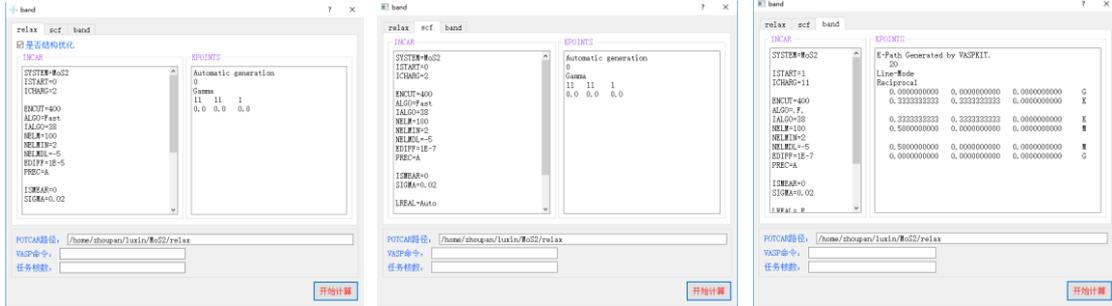
2. Calculation

【Pyxtal】 创建一个 POSCAR 结构，默认保存到桌面。



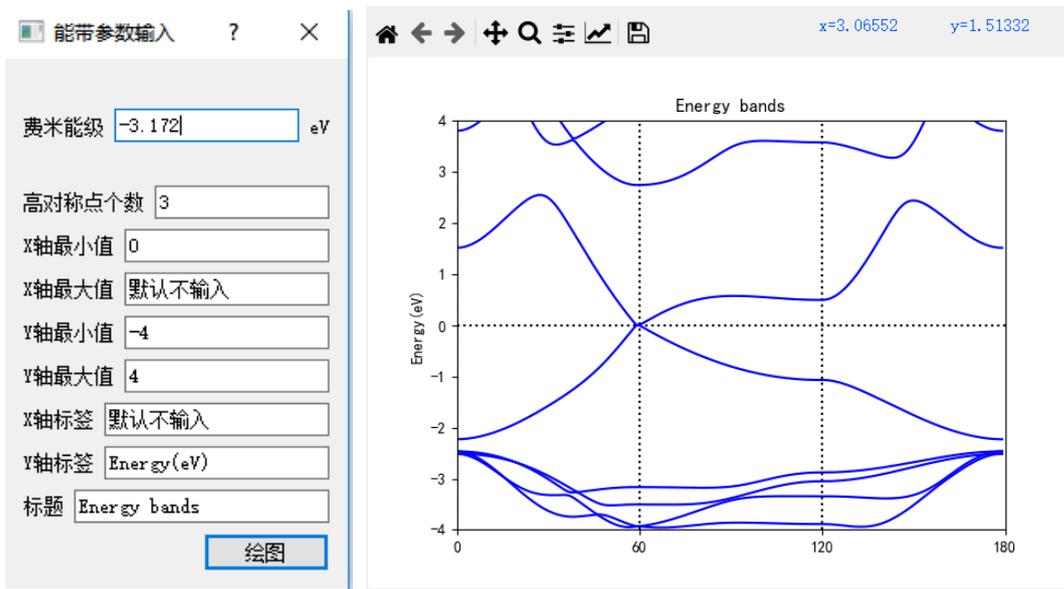
【VASP】 - 【band】 弹出输入面板，分别输入 relax、scf、band 必要文件，单击开始计算，完成从 windows 端投任务。默认在桌面生成 VASP_files 文件夹。



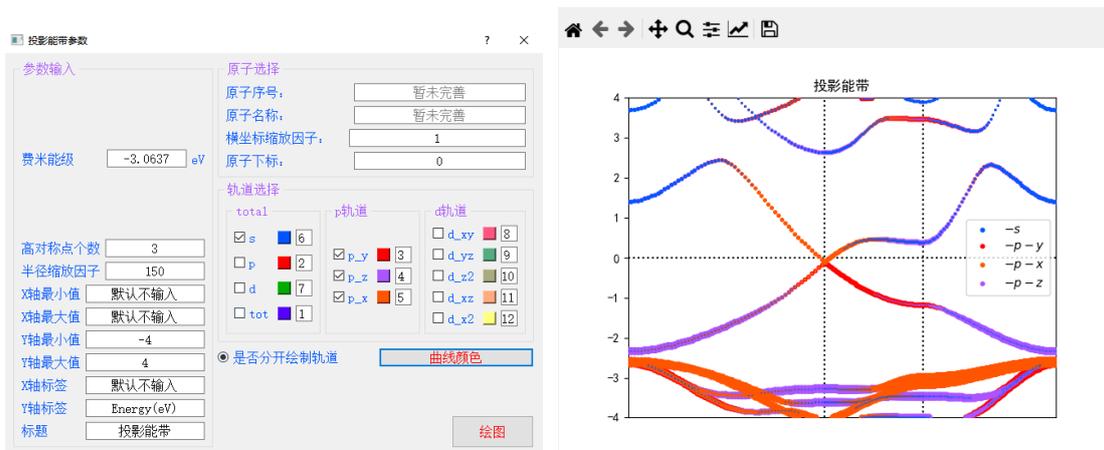


3. Plot

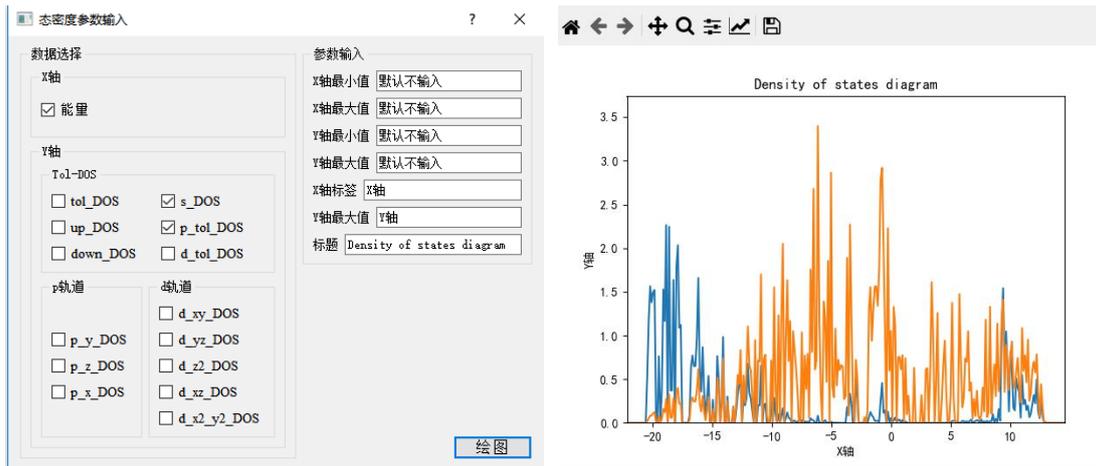
【Bands】单击后选择一个 EIGENVAL 文件，弹出面板框，输入相关参数，单击绘图。



【Projected Band】单击后选择一个 PROCAR 文件，弹出面板框，输入相关参数，单击绘图。

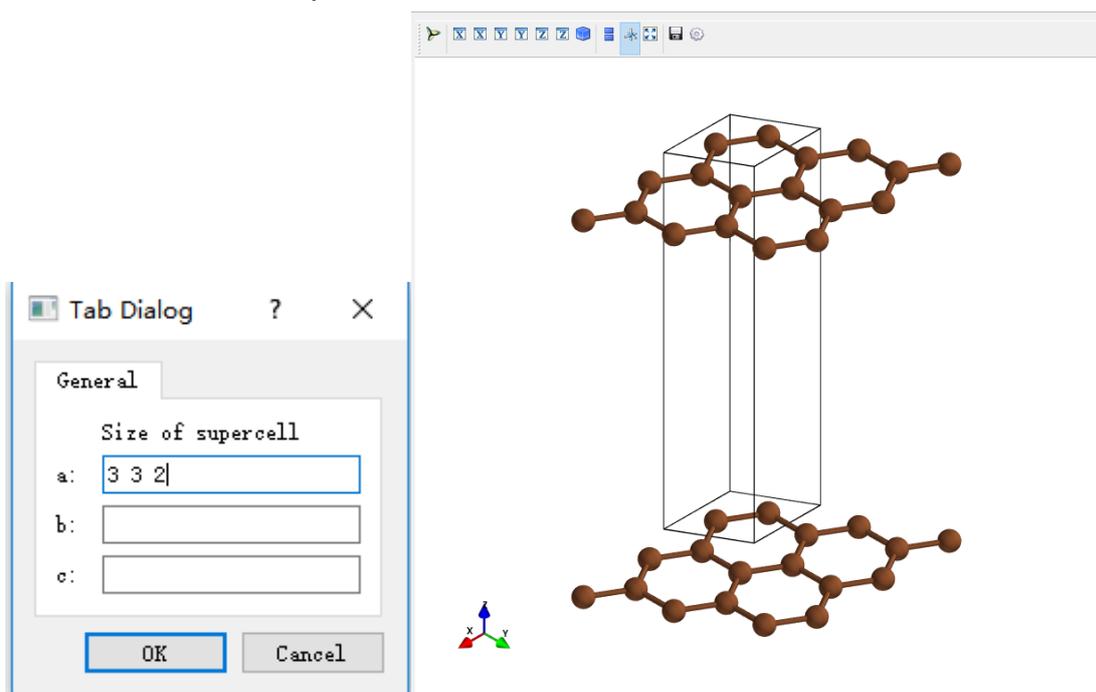


【DOS】单击后选择一个 DOSCAR 文件，弹出面板框，输入相关参数，单击绘图。



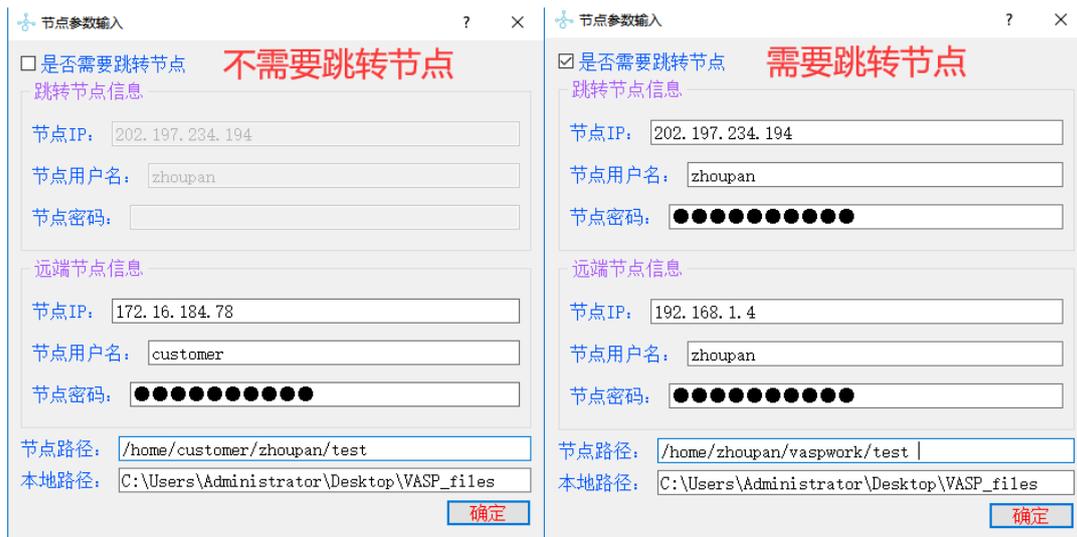
4. Tools

【Supercell】在【Open POSCAR】打开了一个结构的情况下，单击扩胞，弹框输入 3 3 2，扩胞 x 方向 y 方向 3 个单位，z 方向 2 个单位。



5. Settings

【Node Connection】节点连接操作。支持两种连接方式，一种需要跳转的中间节点，一种直接连接。



6. Help

【Instruction】简介说明

【About】关于