

Ex12.7 POSCAR 坐标格式转换脚本使用说明

本脚本 `reformat.py` 用于在 VASP 的 POSCAR 文件中，实现 **Cartesian**（笛卡尔坐标）和 **Direct**（分数坐标）之间的相互转换。

如果对你有帮助，请我喝咖啡，打赏码在下载脚本压缩包里面。下载：[reformat.zip](#)

功能简介

- 只支持命令行运行，并且安装了ase。(没有安装请看本书前面的章节)
- 支持输入标准 POSCAR 文件
- 输出两种格式：
 - Cartesian（笛卡尔坐标）
 - Direct（分数坐标）
- 自动生成新的 POSCAR 文件，不覆盖原文件

文件准备

方法一：放在当前目录（一次性的简单方式）

确保当前目录下包含：

POSCAR

reformat.py

✓ 缺点：

- 每次都要把脚本复制到POSCAR所在的目录。

方法二（推荐）：加入系统路径（避免每次都要复制）

建议将脚本放入 `~/bin`

目录，这样可以在任意路径下直接调用脚本，而无需将其复制到每个工作目录。

步骤：

```
mkdir -p ~/bin
cp reformat.py ~/bin/
chmod +x ~/bin/reformat.py
```

✓ 优点：

- 不需要在 POSCAR 所在目录放置脚本
- 可以在任意目录直接运行

使用方法

1 转换为 Cartesian 坐标的命令：

reformat.py POSCAR c

输出文件：

POSCAR_cartesian

2 转换为 Direct 坐标的命令

reformat.py POSCAR d

输出文件：

POSCAR_direct

参数说明

参数	含义
----	----

POSCAR	输入文件
c	转换为 Cartesian
d	转换为 Direct

总结

`reformat.py` 是一个简单高效的工具，可以快速完成 POSCAR坐标格式转换，在结构处理流程中非常实用。