我们在使用vasp计算能带时，都是使用的分数坐标，但有时在拟合模型时需要将分数坐标转换成笛卡尔坐标，下面讲一下如何进行转换。

首先正格矢与倒格矢有如下关系：

我们设正格矢基矢的矩阵为：

所以只要求出BT，然后乘以原来的分数坐标就行