

VESTA 软件在固体物理学晶体结构教学中的应用

陈善俊 张世杰 陈艳 赵杰*

长江大学物理与光电工程学院

DOI:10.12238/mef.v8i16.16697

[摘要] 晶体结构是固体物理学的核心和基础内容,但其抽象的3D空间构型一直是教学难点。传统依赖于2D图示的教学方法存在抽象性强和静态僵化的问题,难以让学生建立直观的空间认知及深入理解“结构决定性质”的物理本质。VESTA作为一款开源、功能强大的晶体结构可视化软件,凭借“实时3D渲染、多维度结构展示、交互式操作”等特性,成为破解晶体结构教学痛点的关键工具。论文主要分析了传统教学的不足、引入VESTA的必要性及阐述了该软件在复杂结构沉浸式认知和多模式图形阐释等方面的具体用法与显著优势。VESTA的应用构建了从抽象理论到直观模型的桥梁,有效提升学生的空间想象力、科学探究能力及科研前沿素养,是推动固体物理教学现代化转型的有效途径。

[关键词] VESTA; 可视化; 晶体材料; 电子结构

中图分类号: F407.63 **文献标识码:** A

The application of VESTA software in the teaching of crystal structures in solid-state physics

Shanjun Chen Shijie Zhang Yan Chen Jie Zhao*

School of Physics and Optoelectronic Engineering, Yangtze University

[Abstract] The crystal structure is the core and fundamental content of the solid state physics, but its abstract 3D spatial configuration has always been a teaching difficulty. The traditional teaching method that relies on 2D diagrams has the problems of being highly abstract and static, making it difficult for students to establish an intuitive spatial perception and deeply understand the physical essence of "structure determines properties". VESTA, as an open-source and highly functional crystal structure visualization software, with features such as "real-time 3D rendering, multi-dimensional structure display, and interactive operation", has become a key tool for addressing the pain points in crystal structure teaching. This paper mainly analyzes the shortcomings of traditional teaching, the necessity of introducing VESTA, and elaborates on the specific usage and significant advantages of this software in aspects such as immersive cognition of complex structures and multi-modal graphic interpretation. The application of VESTA has established a bridge from abstract theories to intuitive models, effectively enhancing students' spatial imagination, scientific inquiry ability, and cutting-edge research literacy. It is an effective way to promote the modernization transformation of solid physics teaching.

[Key words] VESTA; Visualization; Crystal Materials; Electronic Structure

引言

固体物理学是物理学及相关专业的重要基础课程,而晶体结构作为其核心内容,是理解材料的物理性质的基石^[1]。现有的教材、板书和PPT通常通过二维图形来展示晶胞、晶格常数、原子堆积方式以及密勒指数等概念。然而,晶体本质上是三维的,将三维空间结构压缩到二维平面必然会导致信息的丢失和失真,同时,仅凭二维投影难以建立准确的立体构型,严重依赖个人的空间想象能力,这成为了许多初学者难以逾越的学习障碍,使得学生在学习过程中常常感到枯燥抽象,难以将晶体结构的几何图像与其宏观物理性质相联系,从而影响了整体教学质量与学

生的学习兴趣和效果。因此,引入三维可视化工具,不仅是对教学形式和教学手段的革新和补充,更是对晶体结构教学理念的一次深刻升级。随着计算材料科学与可视化技术的迅猛发展,采用专业的三维可视化软件辅助教学,已成为突破当前教学困境的有效途径。在此背景下,引入功能强大、开源且易于使用的VESTA软件,为固体物理学晶体结构教学提供了新的解决方案。

1 VESTA软件的基本功能与特点

VESTA是由日本科学家开发的专业三维可视化软件,最初作为晶体结构精修软件RIETAN的配套工具,现已发展成为支持多

种文件格式的独立平台^[2]。该软件不仅能够处理CIF、POSCAR、Cube等常见晶体结构文件,还能直接解析VASP及CASTEP等第一性原理计算软件的输出结果。其强大的可视化功能涵盖球棍模型、空间填充模型、多面体配位模式、等值面渲染和晶体形态学展示,同时支持晶格变换、键长键角测量、粉末衍射模拟等专业分析工具,完全免费并且跨平台兼容Windows和Linux系统。其直观的用户界面提供了简化的工具栏,使初学者也能够快速入门使用。在教学领域,它通过直观的三维展示功能,有效帮助学生理解晶体对称性、晶面指数、原子排列等抽象概念,成为晶体学与材料科学教学的重要辅助平台^[3,4]。

2 VESTA在晶体结构教学中的具体应用

固体物理学的核心目标之一,是理解晶体材料的宏观物理性质如何由其微观的晶体结构和电子结构所决定。这一理解建立在几个关键知识点之上:晶格的点阵类型、晶胞参数与对称性、原子的堆积方式与配位环境,以及由此产生的各向异性等。学生对这部分知识的掌握程度,直接决定了他们能否深刻洞察“结构决定性质”这一核心物理思想,并进而具备分析和预测材料性能的能力。然而,这些概念本质上都是三维、抽象且高度依赖空间想象的,这成为了传统教学中的主要障碍。VESTA软件的核心教学价值在于,它能够将这些抽象的晶体学概念与直观的可视化模型动态关联起来,为学生构建一座从理论到直观认知的桥梁。

2.1 晶体结构的教学

传统教学中的二维图示难以准确传达晶体在三维空间中的无限周期性、对称性及原子配位细节。VESTA通过其强大的建模与渲染能力,彻底改变这一局面。

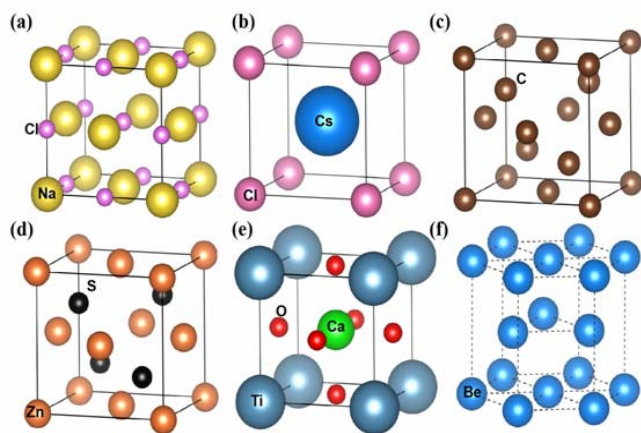


图1 固体物理学教材中的晶体结构的VESTA建模

图1为固体物理教材中第一章的第1.2节所讲解的晶体结构,教师可以轻松地根据教材中的晶胞参数和原子坐标,在VESTA中快速导入或手动构建出钙钛矿(CaTiO_3)、闪锌矿(ZnS)、金刚石等典型结构的三维模型。这个模型直接反映了所有的晶格常数、原子间距和键角。通过鼠标进行实时旋转、平移和缩放,学生可以从任意角度,甚至是“钻入”晶体内部去观察原子的排列方式。这种主动探索式的学习,极大增强了学生的空间感知能力。例

如,在观察面心立方(FCC)结构时,通过动态旋转,学生可以清晰地看到原子是如何进行密堆积的,并可以直观地得出存在于这些球体空隙中的四面体空隙和八面体空隙的位置、大小和数量。VESTA通过这种方式,将教材中的静态知识转化为一个可供学生亲手操作的、动态的微观世界,极大地降低了认知门槛,深化了对晶体结构几何本质的理解。

2.2 灵活多样的图形显示风格

VESTA软件强大的可视化能力不仅在于构建三维模型,更在于其提供了多种可自由切换的图形显示模式。这种功能对于多角度、多层次地阐释同一晶体结构的不同物理内涵具有至关重要的意义。如图2所示,该图以闪锌矿 ZnS 为例,并排展示了同一晶体结构的四种不同显示风格,每一种都对应着一个独特的教学侧重点,极大地拓展了教学表达的维度和深度。

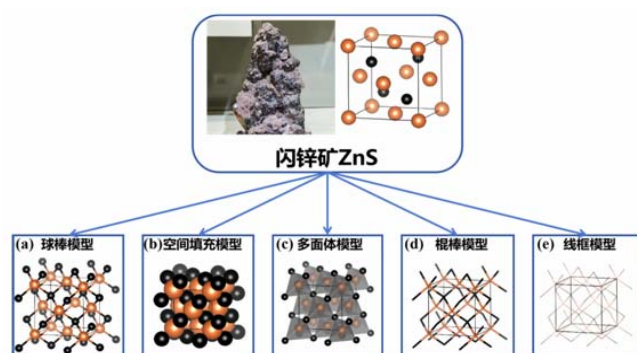


图2 VESTA展示闪锌矿 ZnS 晶体结构的几种不同样式

图2(a)的球棍模型是最常用且学生最易理解的模型。在此模式下,原子被表示为球体,化学键被表示为连接杆。教师可以引导学生测量键长、键角,直观地讲解原子电负性差异以及闪锌矿结构的立方对称性。它完美地服务于“化学键与原子配位”这一核心教学主题。图2(b)为空间填充模型,原子以其范德华半径或离子半径按比例显示为紧密堆积的球体。这种呈现方式有助于学生理解原子的真实相对大小、堆积效率以及晶体内部的空隙。图2(c)是多面体模型,这是理解复杂结构的利器。软件将每个 $[\text{ZnS}_4]$ 四面体配位单元绘制成一个清晰的多面体。此时,教学的焦点从单个原子上升到了“结构基元”的层次。整个闪锌矿结构可以被看作是这些 $[\text{ZnS}_4]$ 四面体通过共顶点方式连接而成的三维网络。将复杂的结构简化为基本单元的组装,化繁为简。图2(d)和2(e)分别是棍棒结构和线框模型,他们十分相似,都是用简单的线条表示化学键。如图2d所示,它极致地凸显了晶体的晶格框架、周期性边界和高度对称性。由于去除了实心球体的遮挡,晶胞的轮廓、原子的排列序列以及各方向上的周期性变得一目了然。教师可以引导学生观察沿 $[100]$ 、 $[111]$ 等不同晶向的原子排列差异,从而为讲解晶体物理性质的各向异性提供最直接的几何结构根源。总之,教师可以根据课堂的讲授重点,灵活调用最合适的模式,将同一个闪锌矿 ZnS 结构分别转化为讲述“化学键”、“致密堆积”、“配位单元”和“晶格对称性”的最佳教具,实现对晶体结构全方位、立体化的深度解析。

3 结论

本文系统阐述了三维可视化软件VESTA在固体物理学晶体结构教学中的作用和具体实例。VESTA的应用不仅可以改变传统的教学模式,更能在深层次上提升教学质量与学习效果。VESTA最重要的贡献在于其能够将抽象复杂的晶体学概念转化为直观的有形视觉表达。通过高质量的三维建模和动态展示,软件使晶格结构、原子排列、对称操作等难以理解的概念变得具体而清晰,极大地降低了学生的学习障碍,促进了其对晶体学本质概念的理解和掌握。VESTA在晶体材料教学中的应用不仅提升了学生的学习体验和参与度,更重要的是使学生能够深入探索、分析和理解晶体材料及其电子结构的复杂世界。

[基金项目]

教育部产学研合作协同育人项目(220602116032600, 220603117263028);湖北省教育厅教学研究项目(2022263);湖北省教育厅新工科建设项目(XGK03053);长江大学教学研究项目(JY2022054)。

[参考文献]

- [1]石锋,韩秀君,张灵翠,等.固体物理学发展简史[J].物理学进展,2021,41(04):170-187.
- [2]Momma K,Izumi F.VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data[J].Applied Crystallography,2011,44(6):1272-1276.
- [3]陈鑫,张辉.Materials Studio和VESTA等软件在电化学教学中的应用[J].大学化学,2020,35(09):194-197.
- [4]李嘉琪.VESTA软件在晶体结构教学中的应用[J].化学教育(中英文),2022,43(9):69-75.

作者简介:

陈善俊(1982--),男,汉族,湖北十堰人,教授,博士,主要从事团簇物理、新型功能材料等相关教学与科研工作。

*通讯作者:

赵杰(1967--),男,汉族,湖北荆州人,副教授,硕士,主要从事物理相关的教学工作。