

VESTA软件在材料化学课程教学中的应用 ——以纳米锑化铟孪晶结构为例

钱银银*, 许瑞

安徽工程大学化学与环境工程学院, 安徽 芜湖 241000

摘要: 在材料化学的教学过程中, 笔者将实验室制备的锑化铟孪晶纳米结构及其相关结构表征数据引入到授课内容之中, 并借助VESTA软件模拟出锑化铟孪晶纳米结构的模型。通过在课堂上对VESTA软件的实时操作, 生动展现了不同角度以及不同显示形式的三维孪晶结构。这种“理论知识讲解+软件操作演示+科研成果案例”相结合的模式, 不仅可以加深学生对孪晶结构的理解, 还能激发学习兴趣, 提升运用科学工具解决实际问题的能力, 实现课堂教学与科研探索的相辅相成。

关键词: 材料化学; 锑化铟; 孪晶结构; 计算机模拟

中图分类号: G64; O6

Utilizing VESTA Software in the Context of Material Chemistry: Analyzing Twin Crystal Nanostructures in Indium Antimonide

Yinyin Qian*, Rui Xu

College of Chemical and Environmental Engineering, Anhui Polytechnic University, Wuhu 241000, Anhui Province, China.

Abstract: Within the framework of materials chemistry education, this study incorporates indium antimonide twin crystal nanostructures and associated structural characterization data from laboratory experiments into the teaching curriculum. Additionally, we employ VESTA software to simulate the indium antimonide twin crystal nanostructure model. By using VESTA software in real-time during lessons, we vividly present three-dimensional twin crystal structures from various angles and display perspectives. This integrated model, combining “theoretical knowledge explanation + software operation demonstration + scientific research results case”, not only enhances students’ comprehension of twin crystal structures but also ignites their enthusiasm for learning. Moreover, it fosters their ability to use scientific tools in practical problem-solving, bridging the gap between classroom instruction and scientific research exploration.

Key Words: Materials chemistry; Indium antimonide; Twin crystal structure; Computer simulation

当前, 我国新材料产业已经进入高速发展期, 急需大批具有扎实理论基础的材料类创新型人才。因此, 对化学与材料类专业学生开设一门兼顾基础理论与应用实践的核心课程就显得尤为重要。材料化学是“化学”与“材料科学”高度交叉融合的一门新兴课程, 它从基础化学理论出发研究各类材料的结构、性能与实际应用之间的关系。通过学习本门课程, 不仅可以使学生对无机化学、有机化学、物理化学以及分析化学等基础化学课程理论进行提炼与升华, 还可以进一步加强学生将理论

收稿: 2023-07-19; 录用: 2023-10-19; 网络发表: 2023-12-04

*通讯作者, Email: qianyinyin@ahpu.edu.cn

基金资助: 国家自然科学基金青年项目(21901004); 安徽工程大学中青年拔尖人才项目

基础与实践创新相结合的能力^[1-5]。

众所周知,材料的主要存在形式为固态,且其中大部分是以晶态形式存在。因此,掌握晶体学的基本知识点是学好本门课程的关键。在本门课程第1章晶体学基础部分的教学过程中,由于学生以往接触到晶体理论方面的知识较少,再加上内容非常抽象,需要有较强的空间想象思维,学生普遍感到比较困难。尤其是在讲授到实际晶体内容中关于孪晶(又称双晶)部分的时候,由于缺乏具体的案例与具象化的晶体结构,使之成为教学中的难点,学生也难以深刻理解孪晶的内部结构特征,最终影响相关知识点的教学效果。

李奇、陈光巨主编的《材料化学》(第3版)(高等教育出版社)定义晶体为“一种内部粒子(原子、分子、离子)或粒子集团在空间按照一定规律周期性重复排列而成的固体”;而定义孪晶为“同一种晶体中的两部分或几部分之间不是由同一点阵贯穿,但它们却是规则地连生在一起形成的晶体”^[1]。从定义上来讲,二者既有联系又有区别。晶体和孪晶的点阵结构都具有一定的规律性,但孪晶的结构比晶体更为复杂。不同的点阵结构如何贯穿在同一种孪晶中,以及这种结构的特殊性对材料的性能产生哪些影响,都需要在授课过程中给学生一一解答,使他们对孪晶这一特殊晶体结构形成更加形象而具体的认知。

笔者的研究方向为III-V族半导体纳米晶体的控制制备、结构分析及其在光电能源转化领域的应用探究。在开展研究的过程中,通过注入法在液相反应体系中合成出了高质量的铋化铟孪晶纳米结构。于是,笔者将科研工作融入到教学之中,以制备所得纳米材料作为具体实例,帮助学生更加直观地理解孪晶这一特殊晶体结构,不仅可以提升相关知识点的教学效果,还能进一步激发学生对科研的兴趣,使他们主动走进实验室,将课堂上的理论知识应用到实践之中。

铋化铟是一类重要的二元III-V族半导体化合物,具有很小的直接带隙结构($E_g = 0.17 \text{ eV}$),在室温下的载流子迁移率高达 $78\,000 \text{ cm}^2 \cdot (\text{V} \cdot \text{s})^{-1}$,使其在纳米功能器件、能源转化以及光电探测领域都有良好的应用前景^[6-8]。晶体材料若形成孪晶结构对其性能会产生显著影响^[9]。因此,研究铋化铟孪晶纳米结构对提升其在相关应用领域的性能十分重要^[10]。

如何将铋化铟孪晶纳米结构生动形象地展现在学生面前是讲解本知识点的关键。如今,随着计算机技术的普及与发展,一些晶体学软件也应运而生,为研究并直观展现晶体结构提供了不少便利。但其中某些晶体软件由于授权价格高昂、内存大以及操作复杂等原因,不适合作为常规的课堂教辅工具。VESTA软件是近年来新开发的一种用于绘制和展示晶体结构及其变换的软件,具有内存小、免安装、操作便捷以及功能全面等优点,其最新版本软件包(ver. 3.5.8)大小仅为14.3 MB,并且可以免费下载,是理想的晶体学教学辅助工具。我们依托材料化学课程,运用VESTA软件,以铋化铟孪晶纳米结构为例,从晶体结构的展示与描述入手,使学生深入了解孪晶这一特殊结构。

1 VESTA软件简介

VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis)是一款应用于晶体与电子结构可视化分析的专业晶体学领域软件,其最新版本及操作手册可在其主页(<http://jp-minerals.org/vesta/en/>)免费下载使用^[11]。若要了解某一材料的晶体结构,首先只需要查阅相关晶体学数据库,如剑桥结构数据库(The Cambridge structural Database, CSD)、无机晶体结构数据库(The Inorganic Crystal Structure Database, ICSD)、开放晶体结构数据库(Crystallography Open Database, COD)等,通过输入所研究材料的相关信息,如元素组成、国际衍射数据中心的粉晶数据库(The Joint Committee on Powder Diffraction Standards, JCPDS)卡片号以及晶胞参数等信息,查找到目标材料的晶体信息文件(Crystallographic Information File, CIF),将其直接导入到VESTA软件中,即可直接获得该材料的晶体结构在三维空间中的晶体结构模型^[12]。以铋化铟材料为例,通过开放晶体结构数据库找到其CIF文件,导入到VESTA软件中,其三维晶体模型如图1所示。图中蓝色球代表铋原子,红色球代表铟原子,可以看出,铋化铟具有立方闪锌矿类型的结构。铋化铟晶体结构还可以通过VESTA软件操作界

面的工具栏进行个性化设置，如晶体结构模型的切换(球棍模型、空间填充模型、多面体模型等)、原子及化学键的重新设置以及晶面显示的角度调整等。最终设置好的晶体结构模型可导出多种文件格式，供不同应用场景选择使用。

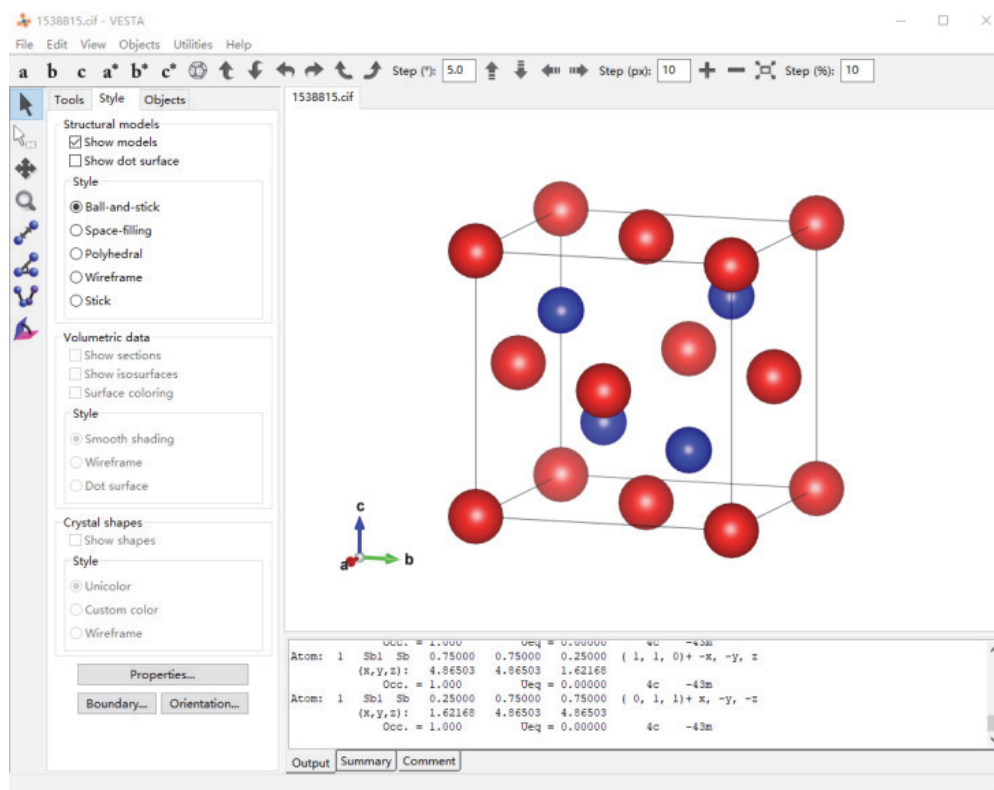


图1 VESTA软件导入锑化铟单晶晶体信息文件后在Windows 10操作系统运行后的主窗口

2 锑化铟孪晶结构的制备与表征

首先通过热注法在溶液相体系中制备出具有孪晶结构的锑化铟纳米线，从样品透射电子显微镜照片(图2a)中可以看出其具有纳米线形貌，并且在沿着纳米线的纵向上均匀地分布着明暗相间的微结构。高分辨透射电子显微镜照片(图2b)显示，样品不仅结晶性良好，还能观察到呈分布对称的明暗条纹，外观上符合材料化学教材中对于孪晶的定义，推断其很可能由两种不同的点阵结构贯穿形成，并且这两种结构是沿着某一晶面呈镜面对称分布的。

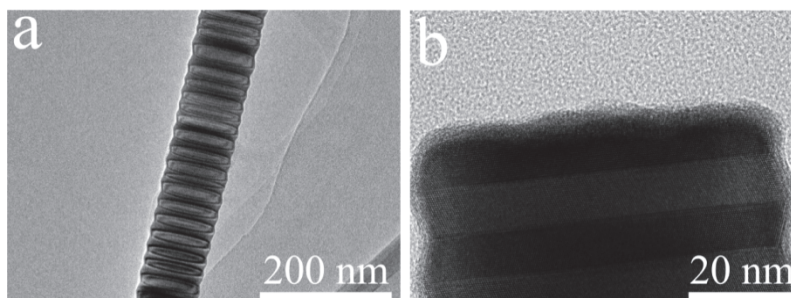


图2 锑化铟孪晶结构的透射电子显微镜照片(a)与高分辨透射电子显微镜照片(b)

3 VESTA软件模拟铈化铟孪晶结构

图3a是铈化铟孪晶结构的高角度环形暗场扫描透射电子显微镜(HAADF-STEM)像,从中能进一步明确样品良好的结晶性,并且能较为清楚地看出铟原子和铈原子均匀地、有规则地排列在纳米线结构之中。同时,图3a中两条黄色平行线所夹的部分为孪晶面,各原子以此为镜面呈镜像分布。换句话说,互为镜像对称的点阵结构贯穿在同一种铈化铟孪晶结构中。同时,结合此原子级分辨的电镜照片以及所制备样品的物相表征结果,可以将其中的孪晶面看成镜面,两侧的原子以此镜面呈对称排布。利用VESTA软件模拟铈化铟孪晶结构,首先找到立方相铈化铟的CIF文件,导入到VESTA文件中,通过Edit-->Edit data-->Unit Cell-->Transform,选择合适的变化矩阵后点击OK;接着导出POSCAR文件,选择Direct分数坐标;用记事本打开POSCAR文件,这里面的坐标是以 c 轴堆叠而成的,只需要增加相同层数的原子坐标,将 $c=0.5$ 的一侧原子坐标保持不变,另一侧原子坐标按照以 c 轴为镜面换算,将VESTA软件导出的POSCAR文件中的原子个数以及坐标进行相应修正(见补充材料),便可得到铈化铟孪晶结构在VESTA软件中的模拟结构图像(图3b),从中可以看出此结构和图3a中的原子级分辨的电镜照片相一致,图3b中两条黄色平行线所夹的部分为孪晶面,与图3a中一一对应。图3中黄色线条所夹部分为孪晶面,这部分晶体结构已经由闪锌矿转变成了纤锌矿结构,其上下部分以孪晶面为镜面成对称分布且均为闪锌矿结构,同时铟原子与铈原子的排布也发生了相应的变化。

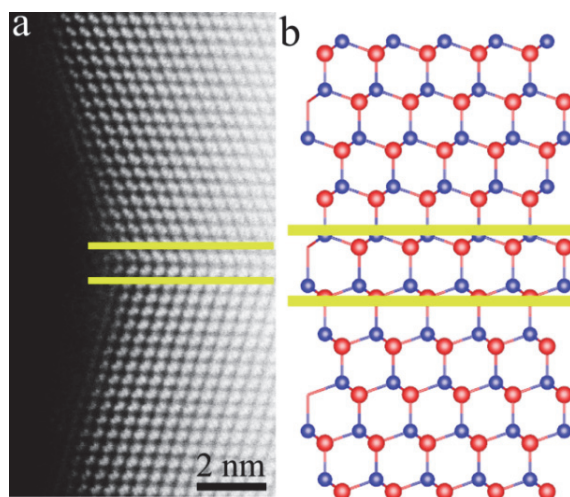


图3 (a) 铈化铟孪晶结构的高角度环形暗场扫描透射电子显微镜(HAADF-STEM)像;
(b) VESTA软件模拟的铈化铟孪晶结构

图中黄色平行线所夹部分为孪晶面,红色球表示为铈原子,蓝色球表示为铟原子;电子版为彩图

利用VESTA软件,所模拟的孪晶结构还可以不同角度和不同显示方式展示,使学生全方位多角度地了解孪晶结构,图4的显示角度比图3b看起来更加具有立体感。如在图4所示空间填充模型的教学中,我们将铈化铟孪晶结构的POSCAR文件发送给学生,让他们进一步自行研究孪晶结构,通过对VESTA软件的亲手操作,不仅能熟悉该晶体学软件的使用方法,还能深化学生对晶体结构的理解,激发学习的主观能动性。

本文结合材料化学课程教学的实际需求,将VESTA软件应用于晶体学基础理论部分的教学之中。尤其是针对孪晶结构这一重点难点内容,笔者结合自己的科研工作,将自制的铈化铟孪晶结构及其表征引入授课内容之中,并利用VESTA软件模拟出对应的晶体结构模型,在课堂上直接展示给学生。这种从抽象到直观的教学方式,不仅能让学生领略到晶体结构模拟对材料研究的推动作用,还能培养学生的科研热情与探索精神,实现教学和科研的相互融合与促进。

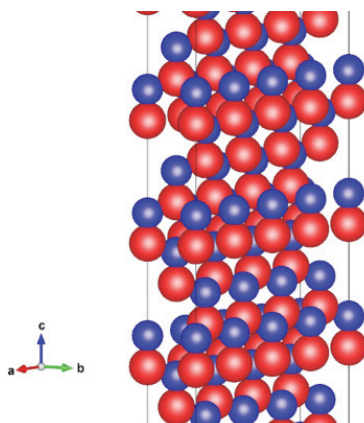


图4 VESTA软件模拟的铌化钽层状结构的空间填充模型

补充材料：可通过链接<https://www.dxxh.pku.edu.cn>免费下载。

参 考 文 献

- [1] 李奇, 陈光巨. 材料化学. 北京: 高等教育出版社, 2022.
- [2] 曹曼丽, 刘文婷, 张秀莲. 化学教育(中英文), **2020**, *41* (10), 12.
- [3] 陈万平. 大学化学, **2016**, *31* (12), 21.
- [4] 陈万平. 化学教育(中英文), **2018**, *39* (10), 5.
- [5] 李媛媛, 何娟, 李恺. 大学化学, **2020**, *35* (5), 61.
- [6] Turini, B.; Salimian, S.; Carrega, M.; Iorio, A.; Strambini, E.; Giazotto, F.; Zannier, V.; Sorba, L.; Heun, S. *Nano. Lett.* **2022**, *22*, 8502.
- [7] Dalekhan, B.; Goransson, D. J. O.; Thelander, C.; Li, K.; Xing, Y. J.; Maisi, V. F.; Xu, H. Q. *Nanoscale* **2020**, *12*, 8159.
- [8] Badawy, G.; Gazibegovic, S.; Borsoi, F.; Heedt, S.; Wang, C. A.; Koelling, S.; Verheijen, M. A.; Kouwenhoven, L. P.; Bakkers, E. *Nano. Lett.* **2019**, *19*, 3575.
- [9] Gudixsen, M. S.; Lauhon, L. J.; Wang, J. F.; Smith, D. C.; Lieber, C. M. *Nature* **2002**, *415*, 617.
- [10] Qian, Y. Y.; Yang, Q. *Nano. Lett.* **2017**, *17*, 7183.
- [11] 方明. 广东化工, **2022**, *13* (48), 200.
- [12] 陈鑫, 张辉. 大学化学, **2020**, *35* (9), 194.