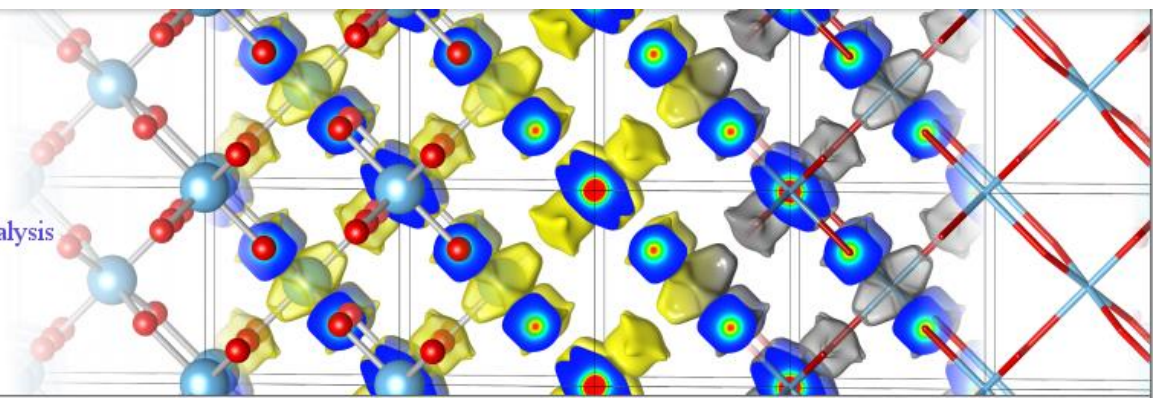


VESTA

Visualization for Electronic and STructural Analysis



VESTA — это программа для 3D-визуализации структурных моделей и объёмных данных, таких как электронная/ядерная плотность и морфология кристаллов.

Данное программное обеспечение распространяется бесплатно для академических, научных, образовательных и некоммерческих пользователей. Пользователи, принадлежащие коммерческим предприятиям, также могут использовать данное программное обеспечение бесплатно до получения лицензии для бизнес-пользователей. Настоящим предоставляется разрешение на использование данного программного обеспечения на следующих условиях:

1) Чертежи, разработанные компанией VESTA, могут быть использованы в любых публикациях при условии явного согласия на их использование. Для VESTA подходит следующая ссылка:

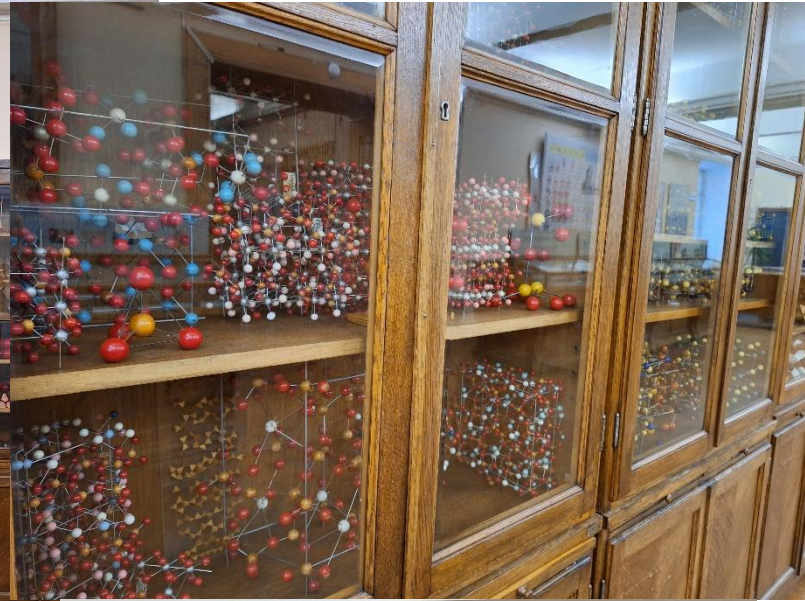
[К. Момма и Ф. Изуми, «VESTA 3 для трехмерной визуализации кристаллических, объемных и морфологических данных», *J. Appl. Crystallogr.*, 44, 1272-1276 \(2011\).](#)

2) Вы не должны распространять какие-либо копии распространяемых файлов без нашего письменного разрешения.

<https://jp-minerals.org/vesta/en/>

Главные особенности программы, делающие этот продукт уникальным: широкий спектр функциональных возможностей, *бесплатность*, простой интерфейс, доступность для начинающего пользователя

Коллекция кафедры кристаллографии геологического факультета МГУ



Поддерживаемые форматы файлов

Программа VESTA может распознавать и генерировать файлы множества форматов, как узкоспециальных для кристаллографической информации, так и общераспространенных. В том числе и файлы специфического формата с расширением *.vesta

Вход

Structure data

1. VESTA format (*.vesta)
2. VICS format (*.vcs)
3. [American Mineralogist Crystal Structure Database](#) (*.amc)
4. [asse](#) (*.asse)
5. [Chem3D](#)
6. [CIF](#) (Crystallographic Information File)
7. [CrystalMaker](#) text file (*.cmt)
8. [CSSR](#) (Crystal Structure Search and Retrieval)
9. [CSD/FDAT](#)
10. [DL_POLY](#) CONFIG
11. [FEFF](#) input file (feff.inp)
12. [FHI-AIMS](#) input file (*.in)
13. GEOMETRY.OUT output by [the Elk FP-LAPW Code](#)
14. [GSAS](#) format (*.EXP)
15. [ICSD](#) (Inorganic Crystal Structure Database)
16. ICSD-CRYSTIN
17. [MDL](#) Molfile
18. [MINCRYST](#) (Crystallographic Database for Minerals)
19. [MOLDA](#)
20. [PDB](#) (Protein Data Bank)
21. Input file of [RIETAN-FP](#) (*.ins)
22. Output file of [RIETAN-FP](#) (*.lst)
23. Input file of [SHELXL](#) (*.ins, *.res)
24. Output files of STRUCTURE TIDY (*.sto)
25. Structure data files output by [USPEX](#)
26. [WIEN2k](#) (*.struct)
27. [XMol XYZ](#) (*.xyz)
28. F01 for [SCAT](#) and C04D for contrd
29. [MXDORTO/MXDTRICL](#) FILE06.DAT, FILE07.DAT
30. XTL file (*.xtl)

В лекции будут использованы стандартизированные файлы кристаллографической информации *.cif, и *.xyz

Объемные данные

31. PRIMA binary format (*.pri; *.prim)
 32. MEED/PRIMA text data (*.den)
 33. Energy Band (*.eb)
 34. General volumetric-data (text format) (*.?ed)
 35. Periodic volumetric-data (text format) (*.grd)
 36. General volumetric-data (binary format) (*.ggrid)
 37. Periodic volumetric-data (binary format) (*.pgrid)
 38. Compressed volumetric-data format (*.m3d)
 39. SCAT volumetric-data files (*.sca, *.scat)
 40. WIEN2k (*.rho) obtained with wien2venus.py
 41. [WinGX](#) 3D Fourier (*.fou)
 42. [X-PLOR/CNX](#) (*.xplor)
- Структура и объемные данные
43. [CASTEP](#) (*.cell, *.charg_frm)
 44. [GAMESS](#) input and 3D surface data files output by [MacMolPlt](#)
 45. [Gaussian](#) Cube format
 46. [VASP](#)
 47. [XCrySDen XSF format](#)

Выход

Структура данных

1. Original format of VESTA (*.vesta)
2. [CIF](#) (Crystallographic Information File)
3. [PDB](#) (Protein Data Bank)
4. SHELXL (*.ins)
5. Standard input file of [RIETAN-FP](#) (*.ins)
6. [XMol XYZ](#)
7. [Chem3D](#) (*.cc1)
8. STL file (*.stl)
9. VRML (*.vrl)
10. [DL_POLY](#) CONFIG
11. Input files of MADEL (*.pme)
12. Input files of STRUCTURE TIDY (*.stin)
13. P1 structure (*.p1)
14. [VASP](#) POSCAR format
15. Fractional coordinates (*.xtl)

Объемные данные

16. PRIMA binary format (*.pri)
17. General volumetric-data (text format) (*.?ed)
18. Periodic volumetric-data (text format) (*.grd)
19. General volumetric-data (binary format) (*.ggrid)
20. Periodic volumetric-data (binary format) (*.pgrid)
21. Compressed volumetric-data format (*.m3d)

Графические форматы (растровое изображение)

1. BMP
2. EPS
3. [JPEG](#)
4. [JPEG 2000](#)
5. PNG
6. PPM
7. RAW
8. RGB (SGI)
9. TGA
10. TIFF

Графические форматы (векторное изображение)

1. EPS
2. PDF
3. PS
4. SVG

Структура файла кристаллографической информации *.xyz

```

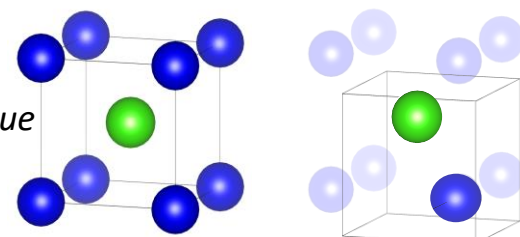
Файл  Правка  Формат  Вид  Справка
|
C11 Cs1
Cs  0.000000  0.000000  0.000000
Cs  0.000000  0.000000  4.115000
Cs  0.000000  4.115000  0.000000
Cs  0.000000  4.115000  4.115000
Cs  4.115000  0.000000  0.000000
Cs  4.115000  0.000000  4.115000
Cs  4.115000  4.115000  0.000000
Cs  4.115000  4.115000  4.115000
Cl  2.057500  2.057500  2.057500
    
```

Общее количество атомов на рисунке

Количество химических элементов на ячейку



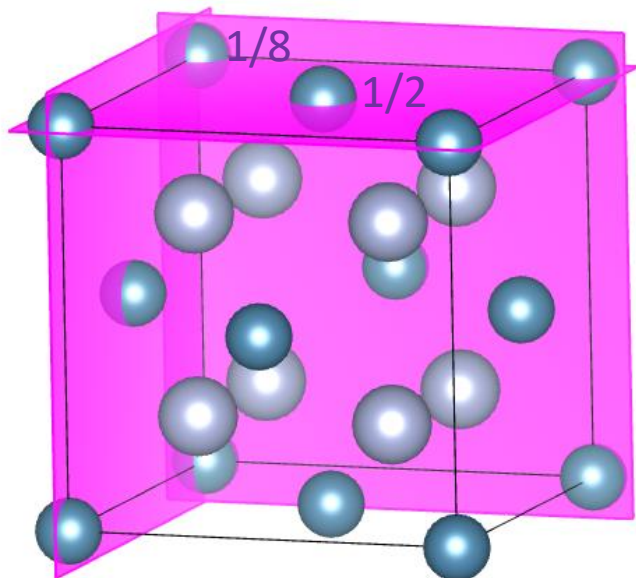
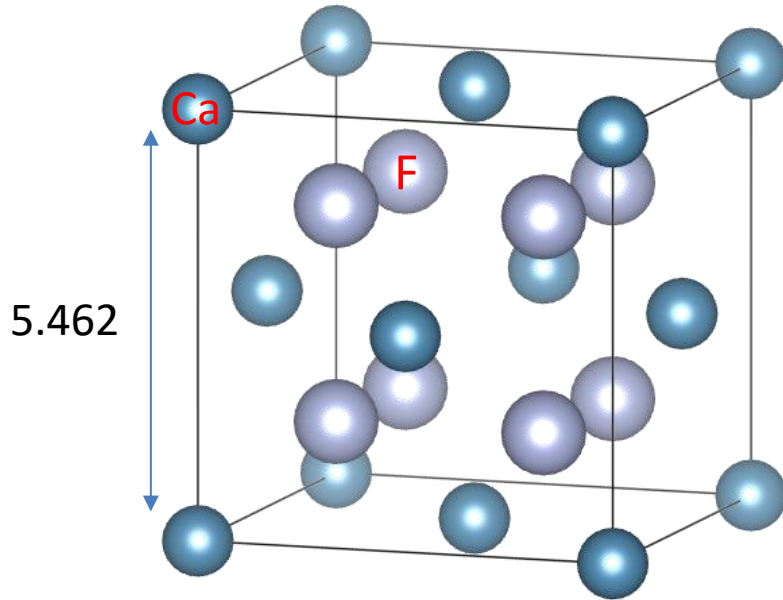
Почему соотношение элементов 1:1?



Координаты каждого атома в абсолютных координатах ($\text{Å} = 10^{-10}\text{м}$) в прямоугольной системе координат



Вид файла *.xyz для флюорита



Почему соотношение элементов 1:2?

Вершинный атом принадлежит одной ячейке на 1/8, а гранный – на 1/2

$$\text{Ca} = 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

$$\text{F} = 8$$

22

Ca1 F2

Ca	0.000000	0.000000	0.000000
Ca	0.000000	0.000000	5.462000
Ca	0.000000	5.462000	0.000000
Ca	0.000000	5.462000	5.462000
Ca	5.462000	0.000000	0.000000
Ca	5.462000	0.000000	5.462000
Ca	5.462000	5.462000	0.000000
Ca	5.462000	5.462000	5.462000
Ca	0.000000	2.731000	2.731000
Ca	5.462000	2.731000	2.731000
Ca	2.731000	0.000000	2.731000
Ca	2.731000	5.462000	2.731000
Ca	2.731000	2.731000	0.000000
Ca	2.731000	2.731000	5.462000
F	1.365500	1.365500	1.365500
F	4.096500	4.096500	4.096500
F	4.096500	4.096500	1.365500
F	1.365500	1.365500	4.096500
F	4.096500	1.365500	4.096500
F	1.365500	4.096500	1.365500
F	1.365500	4.096500	4.096500
F	4.096500	1.365500	1.365500

data_76259-ICSD

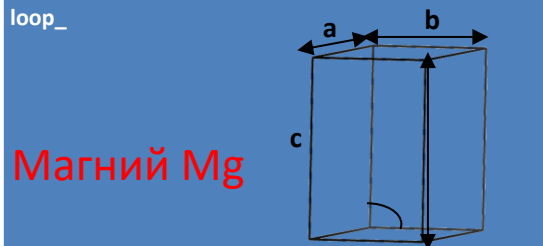
#©2011 by Fachinformationszentrum Karlsruhe, and the U.S. Secretary of
#Commerce on behalf of the United States. All rights reserved.

_database_code_ICSD 76259
_audit_creation_date 2000/12/16
_audit_update_record 2006/04/01
_chemical_name_systematic Magnesium
_chemical_formula_structural Mg
_chemical_formula_sum Mg1
_publ_section_title

Effect of temperature on the lattice parameters of magnesium alloys

loop_
_citation_id
_citation_journal_abbrev
_citation_year
_citation_journal_volume
_citation_page_first
_citation_page_last
_citation_journal_id_ASTM
primary 'Journal of Metals' 1952 4 207 209 JOMTAA
_publ_author_name 'Busk, R.S.'

_cell_length_a 3.2088
_cell_length_b 3.2088
_cell_length_c 5.2099
_cell_angle_alpha 90.
_cell_angle_beta 90.
_cell_angle_gamma 120.
_cell_volume 46.46
_cell_formula_units_Z 2
_symmetry_space_group_name_H-M 'P 63/m m c'
_symmetry_Int_Tables_number 194



Магний Mg

Параметры ячейки, Å (10⁻¹⁰м)

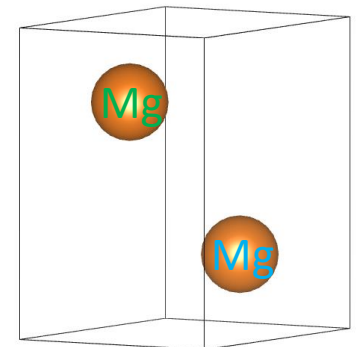
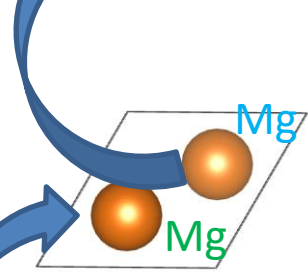
```
_symmetry_equiv_pos_as_xyz
1 'x, x-y, -z+1/2'
2 '-x+y, y, -z+1/2'
3 '-y, -x, -z+1/2'
4 '-x+y, -x, -z+1/2'
5 '-y, x-y, -z+1/2'
6 'x, y, -z+1/2'
7 '-x, -x+y, z+1/2'
8 'x-y, -y, z+1/2'
9 'y, x, z+1/2'
10 'x-y, x, z+1/2'
11 'y, -x+y, z+1/2'
12 '-x, -y, z+1/2'
13 '-x, -x+y, -z'
14 'x-y, -y, -z'
15 'y, x, -z'
16 'x-y, x, -z'
17 'y, -x+y, -z'
18 '-y, -y, -z'
19 'x, x-y, z'
20 '-x+y, y, z'
21 '-y, -x, z'
22 '-x+y, -x, z'
23 '-y, x-y, z'
24 'x, y, z'
loop_
_atom_type_symbol
_atom_type_oxidation_number
Mg0+ 0
loop_
_atom_site_label
_atom_site_type_symbol
_atom_site_symmetry_multiplicity
_atom_site_Wyckoff_symbol
_atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y
_atom_site_fract_z
_atom_site_occupancy
_atom_site_attached_hydrogens
Mg1 Mg0+ 2 0.3333 0.6667 0.25 1 0
```

#End of data_76259-ICSD

Структура сif-файла кристаллографической информации.

Координаты атомов приводятся в относительных координатах или в долях ячейки и только для независимого атома

Относительные координаты 0.33 0.67 0.25
Абсолютные координаты 1.06 2.11 1.30



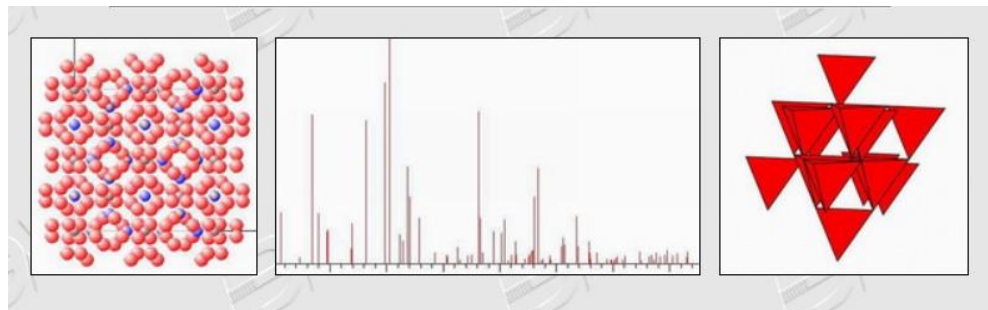
Относительные координаты 0.67 0.33 0.75
Абсолютные координаты 2.11 1.06 3.91

Базы данных кристаллографической информации

Некоторые открытые базы данных структурной информации:

Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных минералов и структурных аналогов

<http://database.iem.ac.ru/>



Открытая база данных по кристаллографии

<http://www.crystallography.net/cod/>



Crystallography Open Database

Открытая база данных по кристаллографии

<http://www.mindat.org/>



Существует множество других баз данных. Например, такие базы как [Inorganic Crystal Structure Database \(ICSD\)](#) или [Pearson's Crystal Data](#)

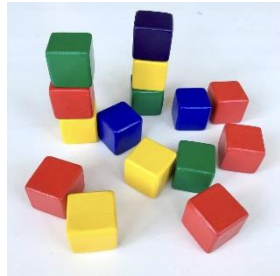
помимо чисто информационной несут еще регистрационную функцию

Структурный тип α -железа

Fe

Структура кубическая. Атом железа занимает строго фиксированное положение без степеней свободы

Для того, что бы нарисовать этот структурный тип необходим всего один параметр – длина ребра элементарной ячейки



Что же мы будем рисовать?

Рисовать мы будем *элементарную ячейку* – минимальный параллелепипед повторяемости, отражающий симметрию кристалла, из совокупности которых в параллельном положении воспроизводится бесконечная периодическая структура

- Задачи:
- рисование кубической ячейки со всеми атомами Fe
 - построение координационного полиэдра вокруг атома Fe
 - ознакомление с инструментальной палитрой программы
 - ознакомление с дизайнерскими возможностями программы
 - сохранение полученной картинке

Полиэдр – это многогранник, вершины которого ближайšie соседи атома (иона) в структуре

$$a = 2.87 \text{ \AA}$$

Кубическая сингония

Пространственная группа $Im\bar{3}m$ (229)

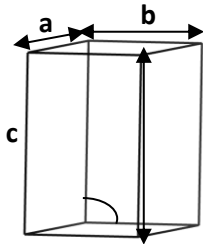
Координаты атома Fe 000

Структурный тип магния

Mg

Структура гексагональная. Атом магния занимает строго фиксированное положение без степеней свободы.

Для того, что бы нарисовать этот структурный тип необходимо 2 параметра – длины ребер элементарной ячейки



$$a = b = 3.209 \text{ \AA}, c = 5.210 \text{ \AA}$$

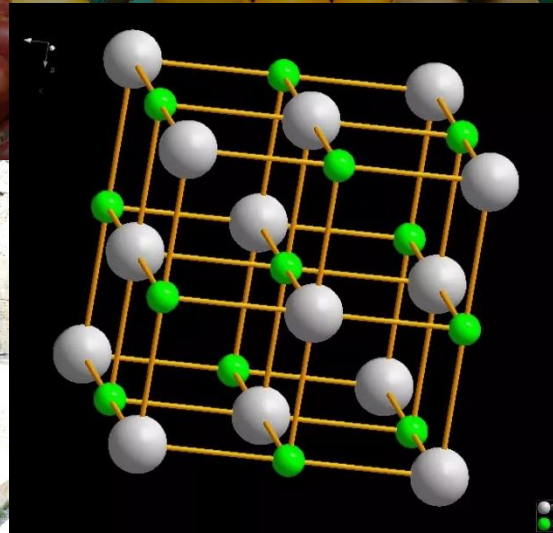
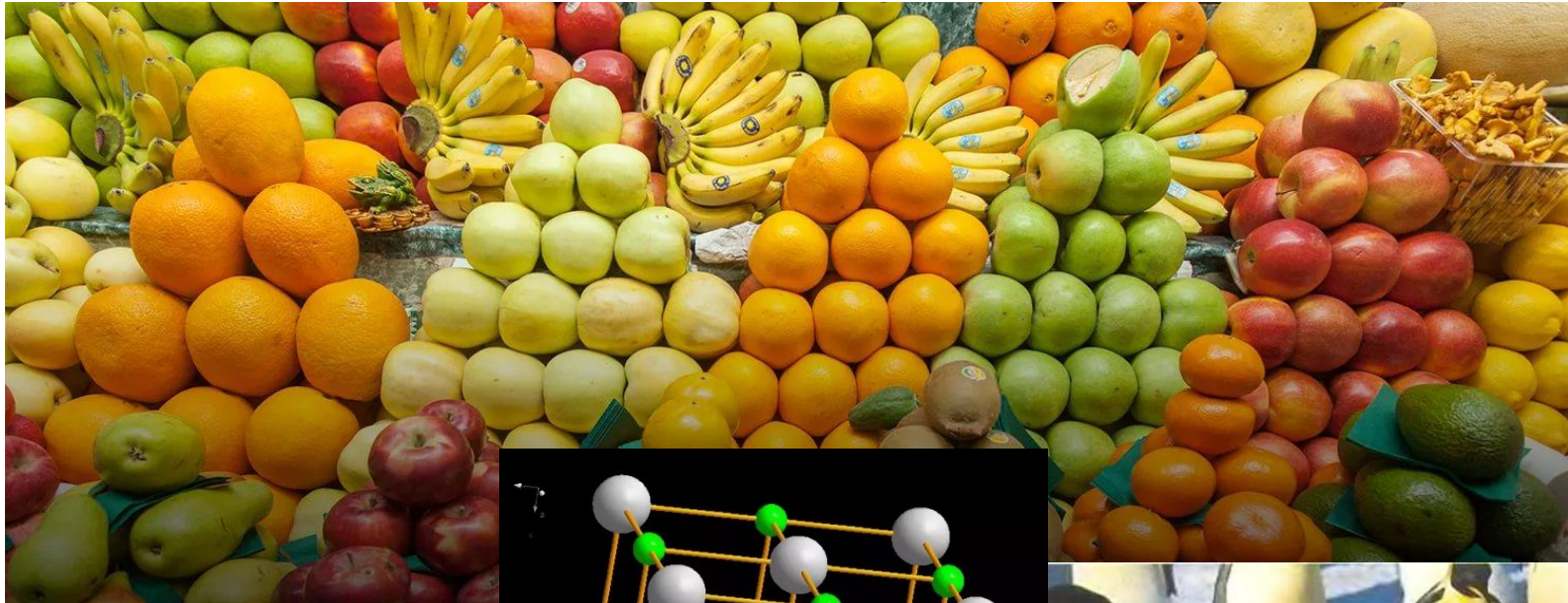
Гексагональная сингония

Пространственная группа $P6_3/mmc$ (194)

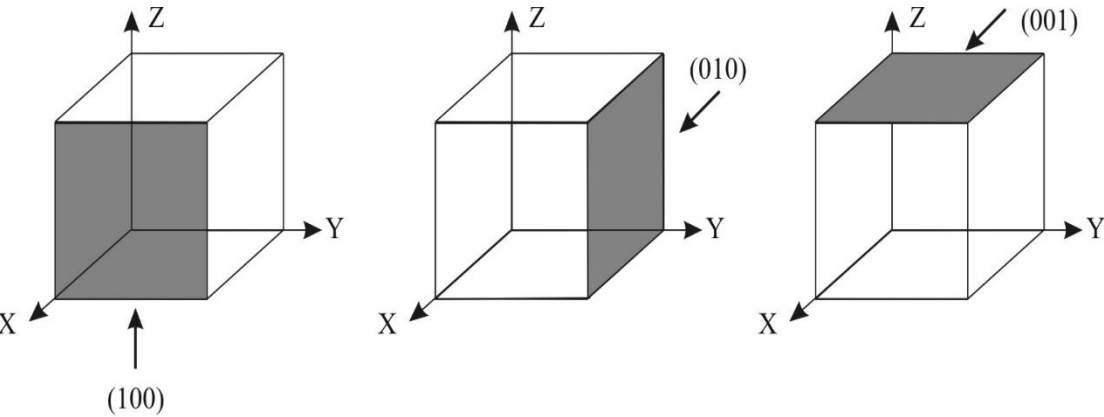
Координаты атома Mg 0.33 0.67 0.25

- Задачи:
- работа с cif-файлами
 - построение плоскостей-сечений структуры
 - построение плотноупакованного слоя

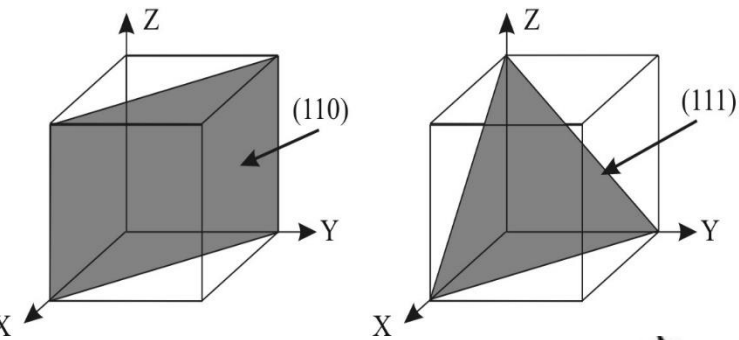
Теория плотнейших упаковок объясняет строение таких разных объектов как кристаллическая структура магния Mg или поваренной соли NaCl, пушечными ядрами, фруктами и пингвинами?



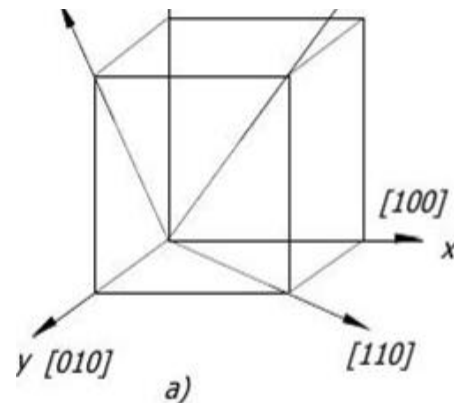
Немного об индексах плоскостей и направлений



Для кубической сингонии индексы направления численно совпадают с индексами перпендикулярной к нему плоскости



Индексы плоскостей обозначаются в круглых скобках (100)



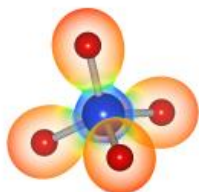
Индексы направлений обозначаются в квадратных скобках [100]



БЕЗ КОММЕНТАРИЕВ!

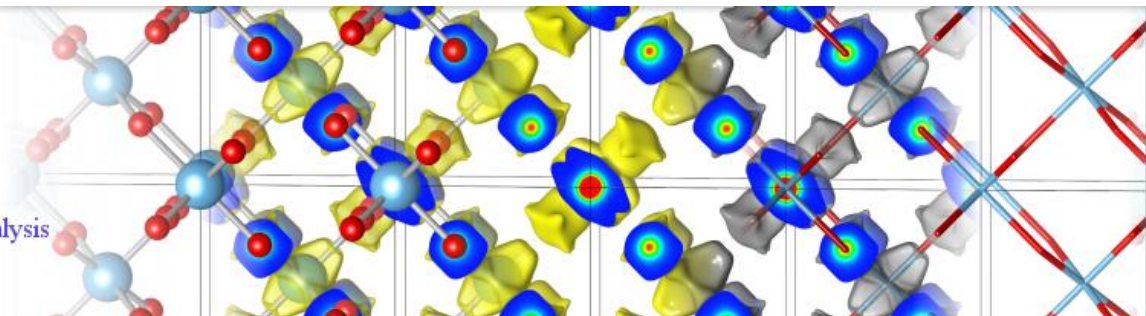
Эта фраза – король всех высказываний, которые вызывают раздражение у корреспондентов. Сразу возникает ощущение, что что-то скрывается, а, следовательно и желание это узнать.

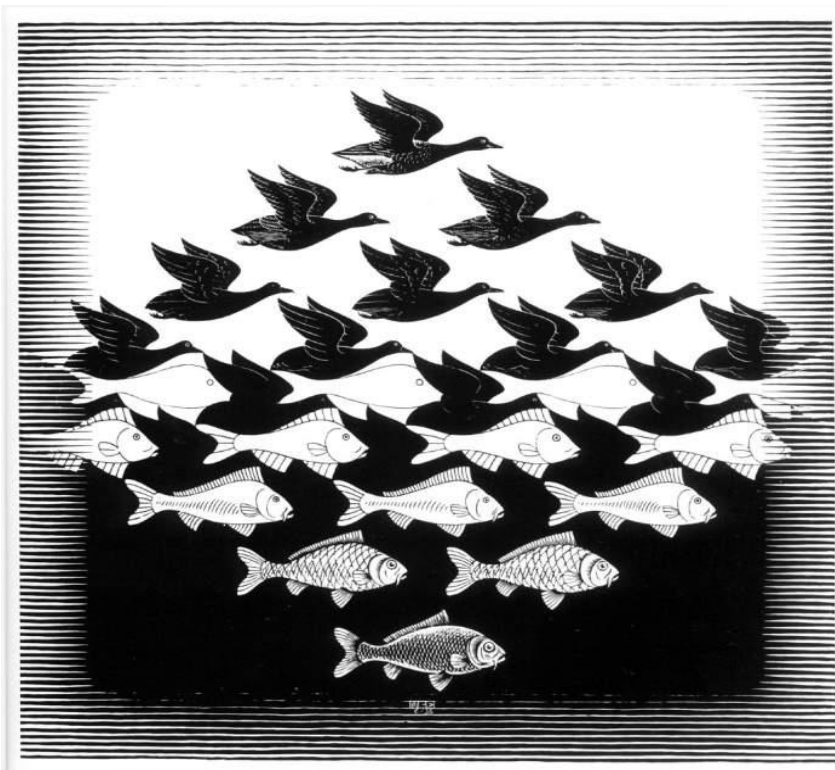
Надеемся, что наша рубрика «без комментариев» если не вызовет еще больший интерес к кристаллографии и кристаллохимии, то просто позволит насладиться художественной эстетикой картинок .



VESTA

Visualization for Electronic and SStructural Analysis





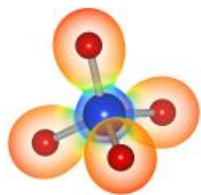
П.Кюри

Симметрия – это не только наиболее общая закономерность, присущая строению и свойствам кристаллического вещества, одно из обобщающих фундаментальных понятий физики и естествознания в целом.



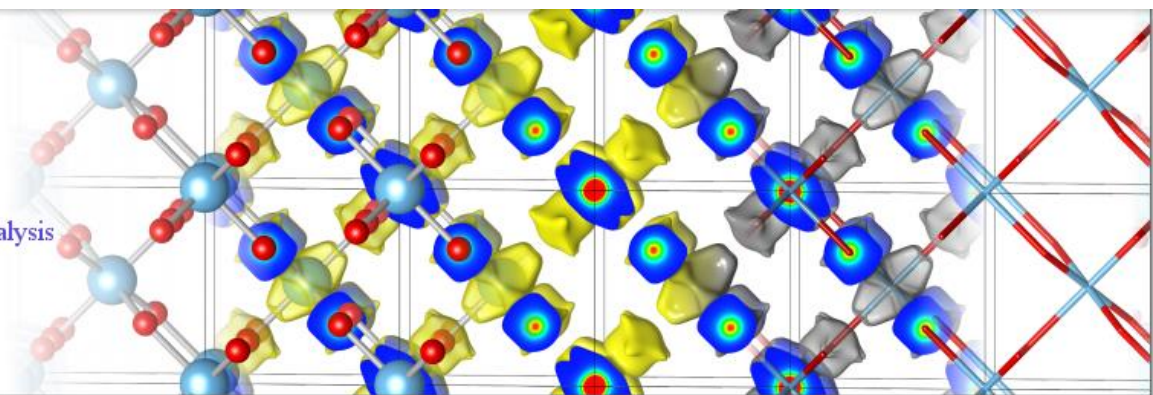
Шубников А.В.

Симметрия, рассматриваемая как закон строения структурных объектов, сродни гармонии. В способности ощущать ее там, где другие ее не чувствуют, и состоит, по нашему мнению, вся эстетика научного и художественного творчества.



VESTA

Visualization for Electronic and SStructural Analysis



Обзор кристаллических структур был сделан на основе примеров и учебных иллюстраций из описания программы:

Tutorial data

- Example input files: [VESTA-Examples.zip](#) (uploaded on Jan 12 2017, 34.1MB)
- [Tutorials.7z](#) (uploaded on Dec 14 2011, 34.8MB)

Просмотр файлов этих разделов очень полезен при знакомстве с программой