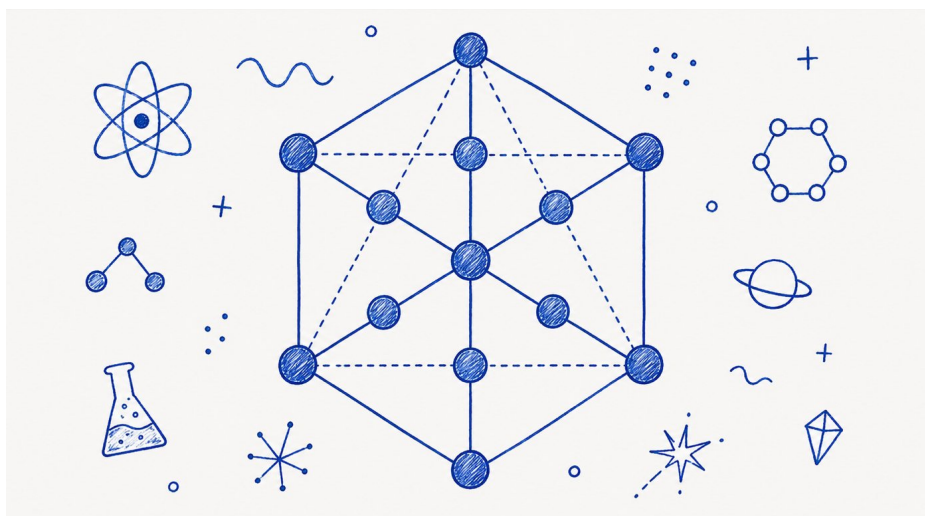

ВОРКШОП ДЛЯ ВЧИТЕЛІВ СТАРШИХ КЛАСІВ

Кристалічні структури: від мінералу до елементарної комірки

Візуалізація у програмі VESTA

Методичні матеріали, інструкція до програми та план уроку



Олег ФЕЯ

кандидат фізико-математичних наук,
куратор освітньої програми «Прикладна фізика» Київського авіаційного інституту,
науковий співробітник Київського академічного університету

Євген НАУМЕНКО

науковий співробітник
Національного науково-природничого музею НАН України

Зміст

Як користуватися цим матеріалом	3
ЧАСТИНА I. Теоретичне підґрунтя	3
1 Що таке кристал	3
1.1 Мова, якою описують кристал	4
2 Властивості матеріалу залежать від його будови	5
3 Матеріали з пам'яттю форми	6
3.1 Де це працює	7
4 Симетрія та операції симетрії	7
4.1 Набір операцій симетрії кристала	9
5 Поліморфізм і фазові діаграми	10
5.1 Вода	10
5.2 Діоксид кремнію: сім структур однієї речовини	11
6 Структура → властивість: чотири приклади	12
6.1 Кальцит CaCO_3 : подвійне променезаломлення	13
6.2 Кордієрит $\text{Mg}_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$: колір, що змінюється	13
6.3 Лепідоліт $\text{KLi}_2\text{AlSi}_4\text{O}_{10}\text{F}(\text{OH})$: чому слюда розшаровується	14
6.4 Морденіт: кристал із дірками	15
6.5 Новітні матеріали в енергетиці	16
ЧАСТИНА II. Робота у програмі VESTA	17
7 Що таке VESTA і де її взяти	17
7.1 Встановлення	17
8 Файли CIF: звідки беруться структури	17
8.1 Безкоштовні бази кристалічних структур	18
9 Інтерфейс головного вікна	18
10 Перші сім кроків: повний цикл роботи	19
11 Керування: миша і клавіатура	20
12 Стили відображення: який коли обирати	21

13 Межі рисунка: скільки комірок показувати	21
14 Зв'язки та координаційні поліедри	22
15 Напрямок погляду та площини	22
16 Вимірювання відстаней і кутів	23
17 Оформлення та експорт	23
18 Типові проблеми і як їх розв'язати	24
ЧАСТИНА III. План уроку	25
19 Паспорт уроку	25
19.1 Мета	25
19.2 Очікувані результати	25
19.3 Ключові поняття	25
19.4 Обладнання та підготовка вчителя напередодні	25
20 Хронометраж: базовий урок (45 хвилин)	26
20.1 Розширений варіант (90 хвилин, воркшоп)	26
21 Детальний хід уроку	26
21.1 Гачок (3 хвилини)	26
21.2 Актуалізація (5 хвилин)	27
21.3 Пояснення нового матеріалу (10 хвилин)	27
21.4 Демонстрація VESTA (5 хвилин)	27
21.5 Підсумок уроку (2 хвилини)	28
22 Практичні станції	28
23 Домашнє завдання	31
24 Критерії оцінювання практичної роботи	32
25 Типові труднощі учнів і як на них реагувати	32
ДОДАТКИ	33
A Файли структур, що додаються до воркшопу	33
Б Робочий аркуш учня	35
В Джерела та корисні посилання	37

Як користуватися цим матеріалом

Цей документ — робочий зошит учителя до воркшопу. Він складається з трьох частин, кожна з яких можна використовувати окремо:

- **Частина I. Теорія.** Стислий конспект змісту презентації воркшопу: що таке кристал, чому властивості речовини визначаються її будовою, симетрія, сингонія, поліморфізм, фазові діаграми та реальні приклади «структура → властивість». Кожен розділ супроводжується питаннями, які можна поставити класу.
- **Частина II. VESTA.** Покрокова інструкція: встановлення, інтерфейс, керування, стилі відображення, поліедри, вимірювання відстаней і кутів, експорт зображень, типові проблеми.
- **Частина III. План уроку.** Готовий сценарій на 45 хвилин і розширений варіант на 90 хвилин, п'ять практичних станцій із конкретними файлами, домашнє завдання, критерії оцінювання та робочий аркуш учня для друку.

Що потрібно для уроку

- Комп'ютери або ноутбуки (1 на 2–3 учнів достатньо; ідеально — 1 на пару).
- Установлена програма **VESTA** (безкоштовна, див. розділ 7).
- Папка з файлами *.cif, що додається до цього воркшопу (перелік — у додатку A).
- Проектор для демонстрації вчителем.
- Бажано: зразки мінералів (кварц, кальцит, слюда, графіт) — навіть найпростіша шкільна колекція робить урок значно живішим.

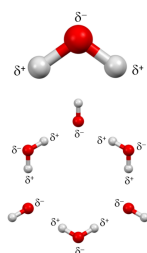
Інтернет під час уроку *не потрібен* — усі файли працюють локально.

ЧАСТИНА I. ТЕОРЕТИЧНЕ ПІДҐРУНТЯ

1. Що таке кристал

Кристал — це тверде тіло, у якому атоми, йони або молекули розташовані *впорядковано й періодично*: одна й та сама група частинок повторюється у просторі через однакові проміжки, як візерунок на шпалерах, тільки у трьох вимірах.

Ключова ідея, з якої варто починати урок: *правильна зовнішня форма кристала (грані, ребра, кути) — це наслідок внутрішнього порядку, а не причина*. Кубик кам'яної солі кубічний тому, що кубічно вкладені йони натрію й хлору, а не навпаки.

Лід, H_2O Кварц, SiO_2 Алмаз, C 

водневі зв'язки

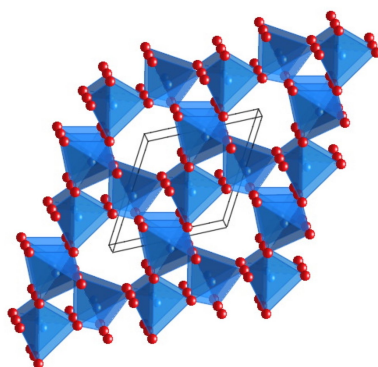
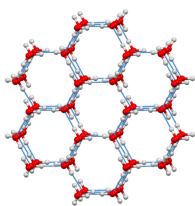
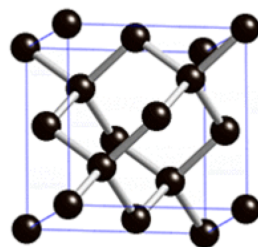
тетраедри SiO_4 тетраедрична сітка C

Рис. 1. Три знайомі кристали та їхня внутрішня будова. Угорі — те, що бачить око; внизу — те, що «бачить» рентген. Саме цей другий ряд ми навчимося будувати самостійно у VESTA.

1.1. Мова, якою описують кристал

Щоб описати нескінченну періодичну структуру, достатньо задати найменший повторюваний фрагмент та правило його повторення.

Елементарна комірка (unit cell)

Найменший паралелепіпед, трансляціями якого можна заповнити весь простір без пропусків і накладань. Задається шістьма числами: довжинами ребер a , b , c (у ангстремах, $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$) і кутами між ними α , β , γ .

Базис

Перелік атомів усередині комірки з їхніми *частковими* (дробовими) координатами x , y , z у межах від 0 до 1. Саме так атоми записані у файлі CIF.

Просторова група

Повний набір операцій симетрії структури. Записується символом Германа–Могена: наприклад, $Fd\bar{3}m$ для алмазу, $P6_3/mmc$ для графіту, $R\bar{3}c$ для кальциту. Усього таких груп рівно 230.

Z

Кількість формульних одиниць в елементарній комірці. Наприклад, для кальциту $Z = 6$: у комірці шість груп CaCO_3 .

Масштаб, який варто назвати вголос

Ребро комірки алмазу — $3,56 \text{ \AA}$, тобто 0,356 нанометра. У кубічному міліметрі алмазу таких комірок близько $2 \cdot 10^{19}$ — це приблизно стільки ж, скільки піщинок у шарі піску завтовшки метр на площі всієї України. Учні краще відчують, *наскільки* мала комірка,

коли чують порівняння, а не лише степені десятки.

Питання до класу

1. Чому сніжинки різні на вигляд, але всі мають шість променів?
2. Скло — це кристал? (Ні: у склі є *ближній* порядок — ті самі тетраедри SiO_4 , — але немає *дальнього*, тобто періодичності. Це аморфне тіло.)
3. Чи може та сама речовина бути і кристалом, і склом? (Так: кварц і кварцове скло.)

2. Властивості матеріалу залежать від його будови

Це центральна теза всього воркшопу. Найкрасивіший її доказ — вуглець. *Однакові атоми, однакова хімічна формула — цілковито різні речовини.*

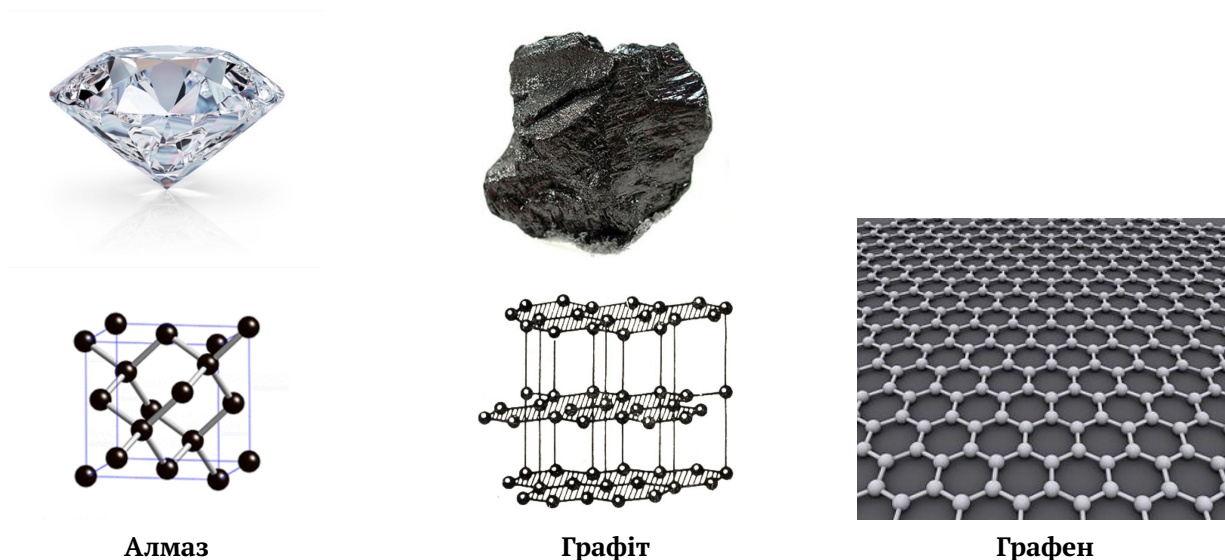


Рис. 2. Три алотропні форми вуглецю. Алмаз — тривимірний каркас із тетраедрів; графіт — стос плоских шестикутних сіток; графен — один-єдиний такий шар.

Табл. 1. Порівняння алотропних форм вуглецю

	Алмаз	Графіт	Графен
Розмірність каркаса	3D	2D-шари, складені в стос	2D, один шар
Гібридизація	sp^3	sp^2	sp^2
Координація атома	4 сусіди	3 сусіди в шарі	3 сусіди
Зв'язок між шарами	—	слабкий, ван-дер-ваальсів	—
Твердість	10 за Моосом (еталон)	1–2, пише на папері	—
Електропровідність	діелектрик	провідник уздовж шарів	напівметал, дуже рухливі носії
Прозорість	прозорий	чорний, непрозорий	прозорий (поглинає 2,3 % світла)
Просторова група	$Fd\bar{3}m$	$P6_3/mmc$	—

Питання до класу

Чому олівцем можна писати, а алмазом — різати скло, якщо це той самий вуглець?
Очікувана відповідь: у графіті міцні зв'язки діють лише *всередині* шару; між шарами — слабка ван-дер-ваальсова взаємодія, тому шари легко ковзають і залишаються на папері. В алмазі кожен атом жорстко зв'язаний із чотирма сусідами в усіх напрямках — зсунути щось неможливо, не розірвавши зв'язки. **На уроці ми виміряємо ці відстані у VESTA і побачимо різницю в числах.**

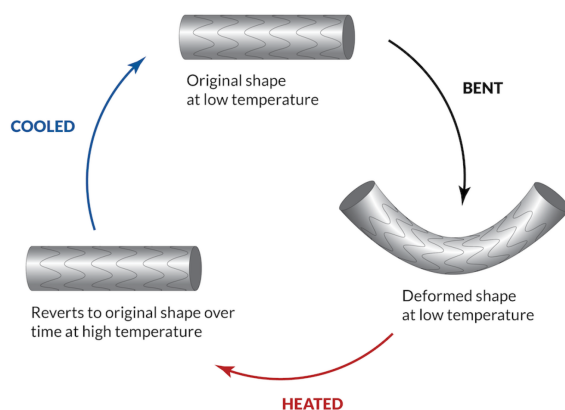
3. Матеріали з пам'яттю форми

Яскравий приклад того, що структура може *змінюватися* — і разом із нею змінюється поведінка матеріалу. Сплави з пам'яттю форми (найвідоміший — нітинол, NiTi) мають дві кристалічні фази:

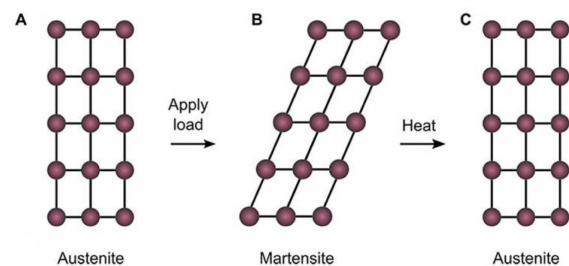
- **аустеніт** — високотемпературна, високосиметрична фаза;
- **мартенсит** — низькотемпературна, менш симетрична фаза, здатна деформуватися без розриву зв'язків — просто перекошуючи комірку.

Деформований у мартенситі виріб при нагріванні переходить в аустеніт — і «згадує» свою вихідну форму.

The Phase Transformation Process for SMAs



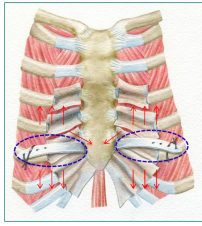
Цикл «деформація – нагрів – відновлення»



Те саме на рівні комірки

Рис. 3. Ефект пам'яті форми. Зверніть увагу: у правій схемі атоми *не міняються місцями* — комірка лише перекошується. Тому перетворення оборотне.

3.1. Де це працює



Медичні імпланти



Брекети



Термомуфти



Авіаційна техніка

Рис. 4. Застосування сплавів із пам'яттю форми: від стоматології до авіадвигунів.

Український контекст

Сплави з пам'яттю форми винайдені й активно досліджуються в **Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України** — партнерському інституті освітньої програми «Прикладна фізика». Це гарний момент сказати класу, що матеріалознавство світового рівня робиться в Києві, а не лише «десь там».



Рис. 5. Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ.

4. Симетрія та операції симетрії

Операція симетрії — це перетворення, після якого об'єкт виглядає так само, як і до нього. Якщо заплющити очі, хтось виконає операцію, а ви розплющите очі — ви не помітите змін.

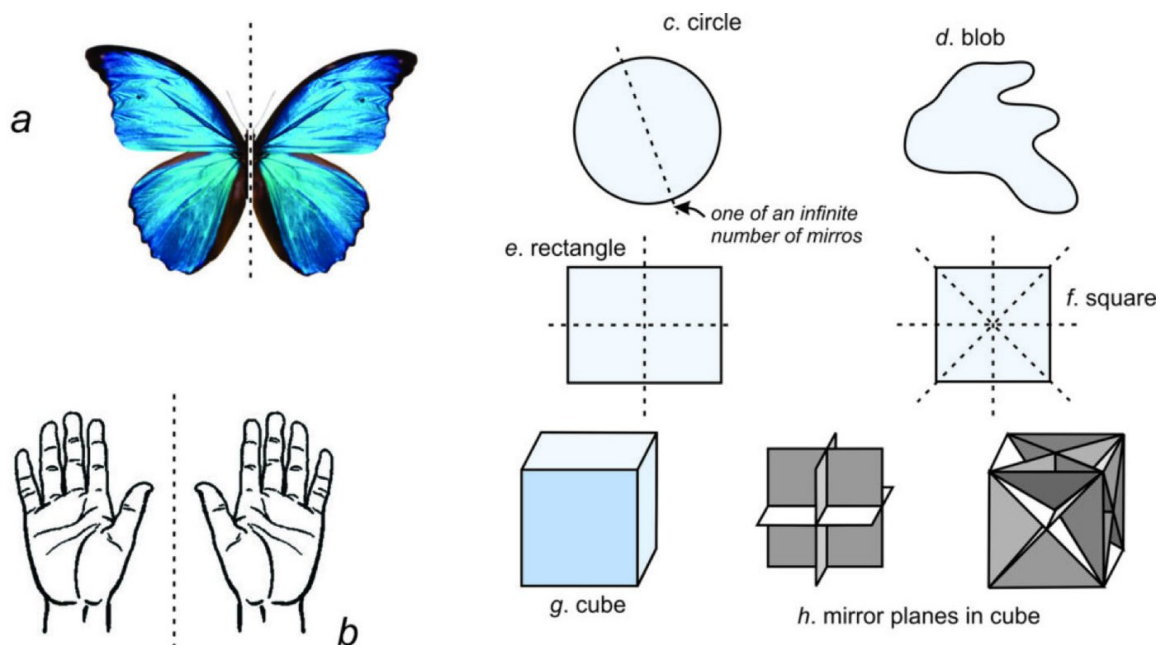


Рис. 6. Дзеркальна симетрія. Метелик і долоні мають одну площину дзеркала; коло — нескінченно багато; безформна пляма — жодної. Куб має аж дев'ять дзеркальних площин.

symmetry operator	2-dimensional example	3-dimensional example
1	360°	360°
2	180°	180°
3	120°	120°
4	90°	90°
6	60°	60°

Рис. 7. Осі обертання, дозволені в кристалах: 1, 2, 3, 4 і 6-кратні — тобто поворот на 360°, 180°, 120°, 90° і 60°. Зліва — двовимірні приклади, справа — реальні форми кристалів.

Класичне запитання: чому немає 5-кратної осі?

Запропонуйте учням вимостити підлогу правильними п'ятикутниками — без щілин це неможливо. Трикутниками, квадратами й шестикутниками — можна. Саме тому в кристалах бувають осі 1, 2, 3, 4 і 6, але не 5 і не 7.

Для сильного класу: а квазікристали (Нобелівська премія з хімії 2011 р., Дан Шехтман) якраз мають 5- і 10-кратну симетрію — але вони *не періодичні*. Тобто заборона стосується саме періодичних структур.

4.1. Набір операцій симетрії кристала

Табл. 2. Операції симетрії, з яких будуються 230 просторових груп

Операція	Що робить	Позначення
Трансляція	зсув на вектор ґратки	a, b, c
Поворот	обертання на $360^\circ/n$	$1, 2, 3, 4, 6$
Дзеркало	відбиття у площині	m
Інверсія	відбиття в точці (центр симетрії)	$\bar{1}$
Інверсійна вісь	поворот + інверсія	$\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$
Гвинтова вісь	поворот + зсув уздовж осі	$2_1, 3_1, 6_3, \dots$
Площина ковзання	відбиття + зсув у площині	a, b, c, n, d

Комбінуючи ці операції, отримуємо ієрархію, яку варто показати як «матрьошку»:

- 7 сингоній (кристалічних систем)
- 14 ґраток Браве
- 32 точкові групи (класи симетрії)
- 230 просторові групи

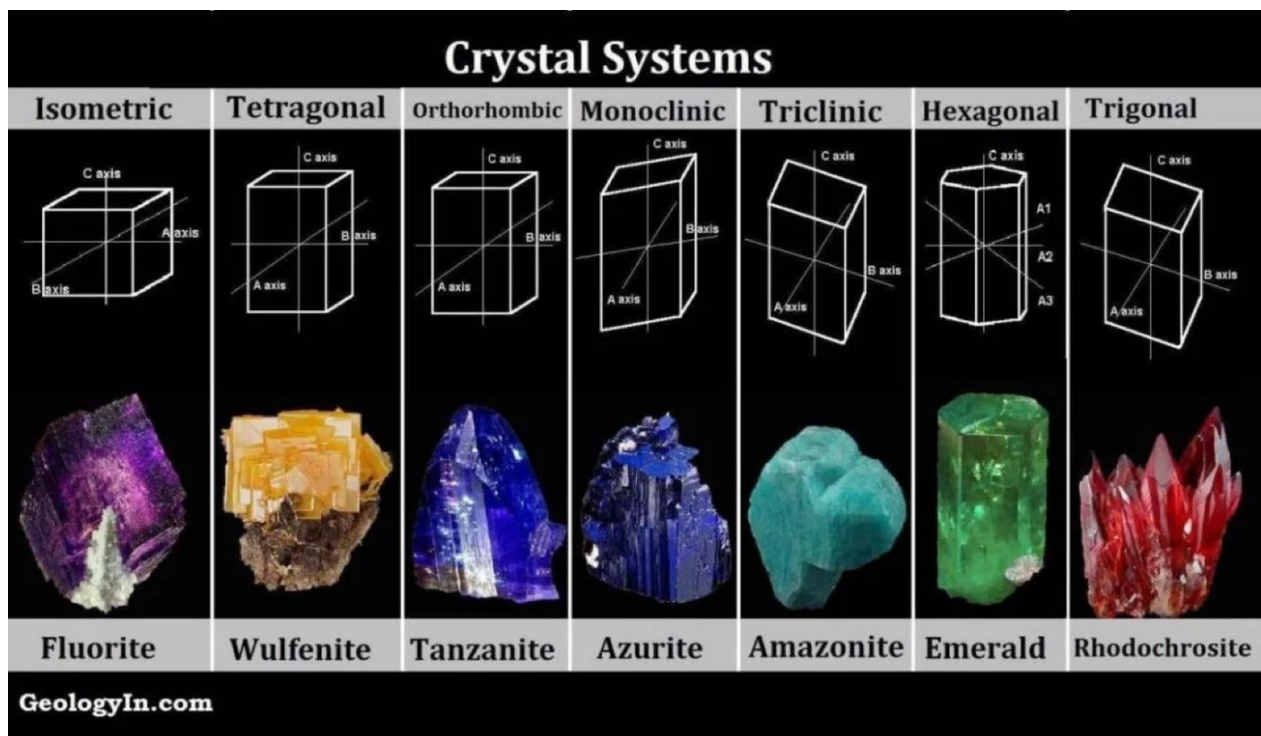


Рис. 8. Сім сингоній із характерними прикладами мінералів. Сингонія визначається не формою зразка, а співвідношеннями між a, b, c та кутами α, β, γ .

Табл. 3. Сім сингоній: умови на параметри комірки

Сингонія	Ребра	Кути
Кубічна (ізометрична)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональна	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ромбічна (орторомбічна)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Гексагональна	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Тригональна (ромбоедрична)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Моноклінна	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Триклінна	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Як це перевірити просто зараз

Відкрийте у VESTA будь-який файл із папки й подивіться у вкладку **Summary** текстової області: там написані просторова група та параметри комірки. Порівняйте *Diamond.cif* ($a = b = c$, усі кути 90° — кубічна) і *Lepidolite.cif* ($\beta = 99,8^\circ$ — моноклінна). Класифікація перестає бути абстракцією, коли її видно у файлі.

5. Поліморфізм і фазові діаграми

Поліморфізм — здатність однієї речовини існувати у кількох кристалічних формах залежно від температури й тиску. Це прямий місток від кристалографії до термодинаміки, яку учні вже вивчали.

5.1. Вода

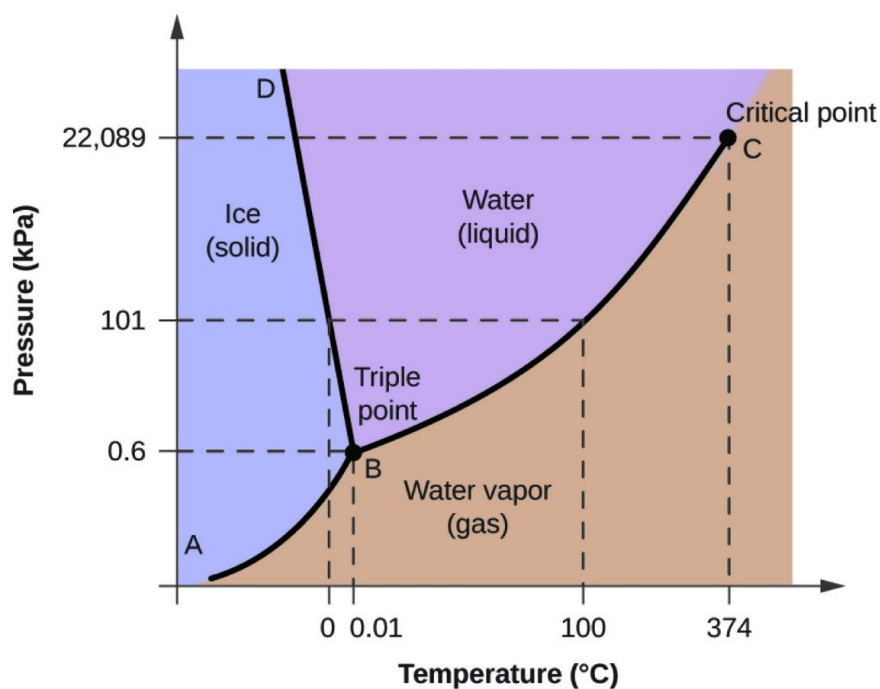


Рис. 9. Фазова діаграма води. **В** — трійна точка (0,01 °C, 0,6 kPa), де співіснують лід, вода й пара. **С** — критична точка (374 °C, 22 089 kPa), за якою зникає різниця між рідиною та газом.

Питання до класу

Зверніть увагу на нахил лінії плавлення (ділянка **В–D**): у води вона нахилена *вліво*, тобто з підвищенням тиску лід плавиться за *нижчої* температури. Майже в усіх інших речовин навпаки. Чому?

Відповідь: бо лід *менш* густий за воду — його гексагональний каркас із водневих зв'язків має великі порожнини. Тиск «вигідніше» витратити на руйнування цього пухкого каркаса. Саме тому лід плаває, а водойми не промерзають до дна. **Цю порожнинну структуру ми побачимо у VESTA у файлі Ice_1h.cif** — і там-таки переконаємося числом: густина, обчислена з параметрів комірки, дорівнює $0,93 \text{ г/см}^3$, тобто менша за $1,00 \text{ г/см}^3$ у води.

5.2. Діоксид кремнію: сім структур однієї речовини

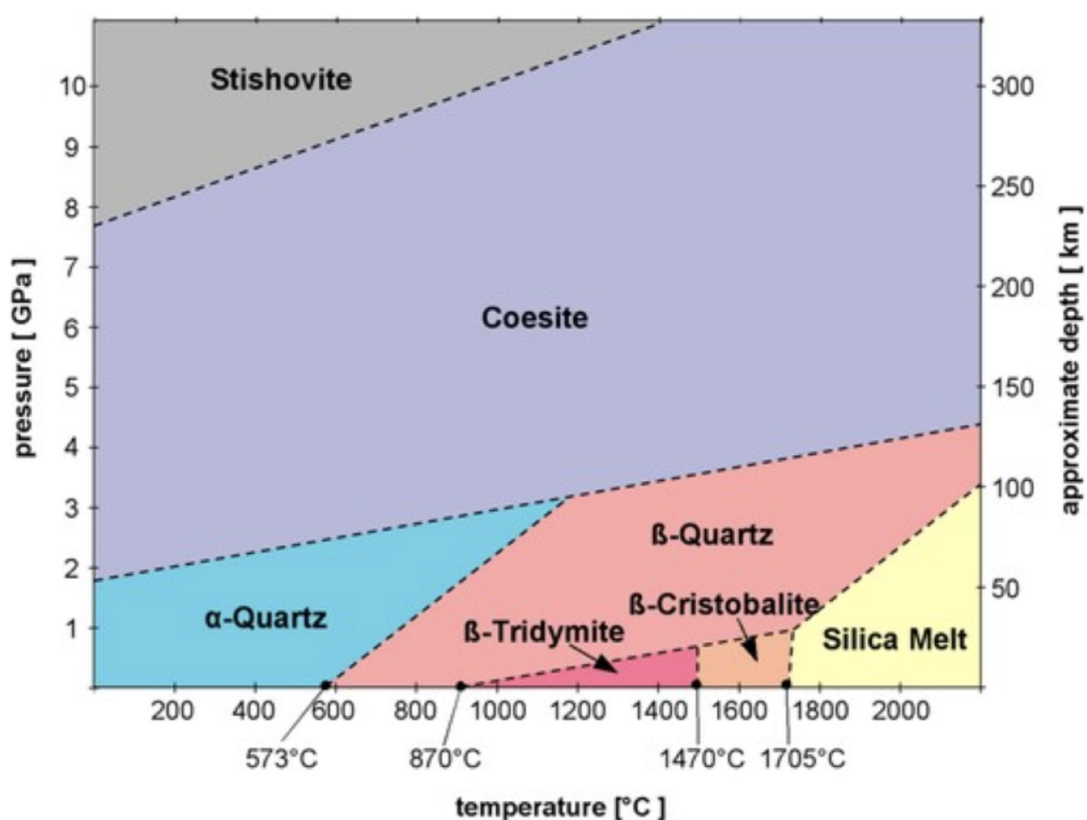


Рис. 10. Фазова діаграма SiO_2 (за Royce, Baars & Viles, 2021). Права вісь — приблизна глибина в надрах Землі. Зверніть увагу: α -кварц $\rightarrow$ β -кварц відбувається за 573°C — це та сама температура, за якої кварц у кераміці «стрибає» в об'ємі й тріскає невдало випалені вироби.

У шести із семи форм атом кремнію сидить у центрі *тетраедра* SiO_4 ; змінюється лише спосіб з'єднання тетраедрів між собою. І лише у стишовіту, який утворюється за найбільших тисків, координація змінюється на *октаедричну* (SiO_6) — і густина одразу стрибає майже вдвічі.

Табл. 4. Поліморфи SiO_2 з папки воркшопу, у порядку зростання густини. V — об'єм комірки, Z — кількість формульних одиниць у ній, V/Z — об'єм на одну формульну одиницю SiO_2 , КЧ — координаційне число кремнію. Густина обчислено з даних файлу за формулою $\rho = 1,6605 ZM/V$, де $M(\text{SiO}_2) = 60,08 \text{ г/моль}$, V — у $\text{\AA}^3$, а ρ — у г/см^3 .

Поліморф	Група	$a, b, c \text{ (\AA)}$	V	Z	V/Z	ρ	КЧ	Умови
β -кристобаліт	$I\bar{4}2d$	4,955; 4,955; 7,311	179,5	4	44,9	2,22	4	понад 1470 °C
Тридиміт	$P2_1$	4,931; 8,180; 5,005 ($\beta = 118,4^\circ$)	177,6	4	44,4	2,25	4	870–1470 °C
α -кристобаліт	$P4_12_12$	4,993; 4,993; 6,934	172,8	4	43,2	2,31	4	метастабільний
β -кварц	$P6_422$	5,061; 5,061; 5,541 ($\gamma = 120^\circ$)	122,9	3	41,0	2,44	4	573–870 °C
α -кварц	$P3_121$	4,915; 4,915; 5,431 ($\gamma = 120^\circ$)	113,6	3	37,9	2,63	4	звичайні умови
Коесит	$C2/c$	7,050; 12,291; 7,032 ($\beta = 119,1^\circ$)	532,5	16	33,3	3,00	4	приблизно 2–8 ГПа
Стишовіт	$P4_2/mnm$	4,233; 4,233; 2,693	48,3	2	24,1	4,13	6	понад 8 ГПа

Файли — у порядку рядків таблиці:

beta_cristobalite.cif Tridymite.cif alpha_cristobalite.cif
beta_quartz.cif alpha_quartz.cif Coesite.cif Stishovite.cif

Головне, що варто прочитати в цій таблиці вголос разом із класом: від β -кристобаліту до стишовіту об'єм, який припадає на одну формульну одиницю SiO_2 , зменшується від 44,9 до 24,1 $\text{\AA}^3$ — майже вдвічі. Атомів стільки самісінько, змінюється тільки їхнє пакування. Саме це і є «структура визначає властивість» у чистому вигляді.

Скільки насправді важить кубічний сантиметр: модель проти довідника

Обчислені густини корисно порівняти з експериментальними значеннями за звичайних умов: кварц 2,65, тридиміт 2,26, кристобаліт 2,33, коесит 2,91, стишовіт 4,29 г/см^3 . Збіг дуже добрий — тож учні бачать, що модель у файлі описує *реальну* речовину.

Дві розбіжності варті окремої репліки:

- **Коесит: 3,00 замість 2,91.** Дані у файлі взято з роботи про *стиснення* коеситу (Angel, Shaw & Gibbs, 2003), тому комірка в ньому дещо менша за ту, що при атмосферному тиску ($V = 532,5$ проти приблизно $549 \text{ \AA}^3$). Це не помилка, а саме те, про що йдеться на станції 2: тиск стискає структуру. Різницю можна навіть порахувати — близько 3 % за об'ємом.
- **Стишовіт: 4,13 замість 4,29.** Файл отримано теоретичним розрахунком, а розрахунок трохи «розпушує» комірку. Порядок величини і стрибок відносно кварцу відтворюються правильно.

Стишовіт як детектив

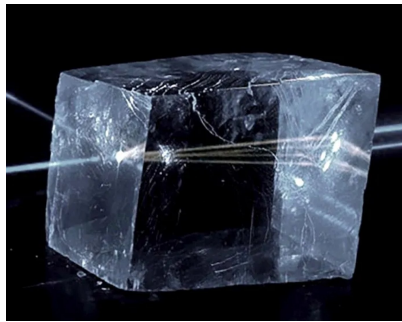
У стишовіті атом кремнію оточений *шістьма* атомами кисню замість звичних чотирьох — структура типу рутилу. Утворюється лише за величезних тисків, тому знахідка стишовіту в породі — надійний доказ удару метеорита. Саме так підтвердили ударне походження кратера Ріс у Німеччині й кратера Чикшулуб. Коесит працює так само: його вперше знайшли в природі 1960 року саме в Аризонському метеоритному кратері — до того він існував лише як продукт лабораторного синтезу за високого тиску.

6. Структура → властивість: чотири приклади

6.1. Кальцит CaCO_3 : подвійне променезаломлення



Напис роздвоюється



Промінь розділяється надвое

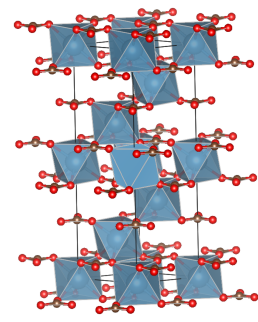
Структура, $R\bar{3}c$

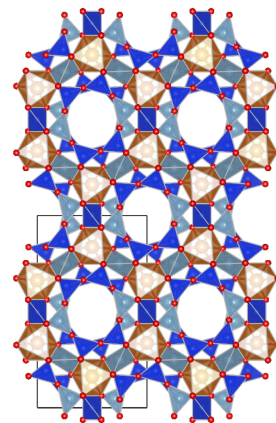
Рис. 11. Ісландський шпат (прозорий кальцит) роздвоює зображення. Причина видно праворуч: плоскі трикутні групи CO_3 лежать паралельними шарами, тому кристал по-різному взаємодіє зі світлом уздовж і поперек цих шарів.

Явище називається **подвійним променезаломленням (біфрингенцією)**: світло в кристалі розділяється на два промені з різними показниками заломлення ($n_o = 1,658$ і $n_e = 1,486$ — найбільша різниця серед поширених мінералів). Причина — *анізотропія*: структура не однакова в різних напрямках.

6.2. Кордієрит $\text{Mg}_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$: колір, що змінюється



Той самий кристал, різні кути повороту



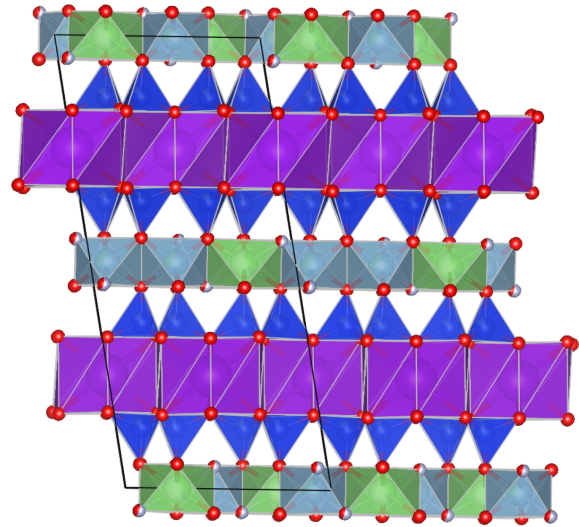
Кільця з тетраедрів, канали вздовж осі

Рис. 12. Плеохроїзм кордієриту: від синьо-фіолетового до майже безбарвного залежно від напрямку спостереження. Легенда каже, що вікінги використовували кордієрит як «сонячний камінь» для навігації в похмуру погоду.

6.3. Лепідоліт $\text{KLi}_2\text{AlSi}_4\text{O}_{10}\text{F}(\text{OH})$: чому слюда розшаровується



Кристали лепідоліту



Пакети «тетраедри–октаедри–тетраедри»

Рис. 13. Шарувата структура слюд. Міцні силікатні пакети (сині тетраедри й фіолетові октаедри) з'єднані між собою слабо — через шар йонів калію. Тому слюда розщеплюється на тонесенькі прозорі пластинки: це **досконала спайність**.

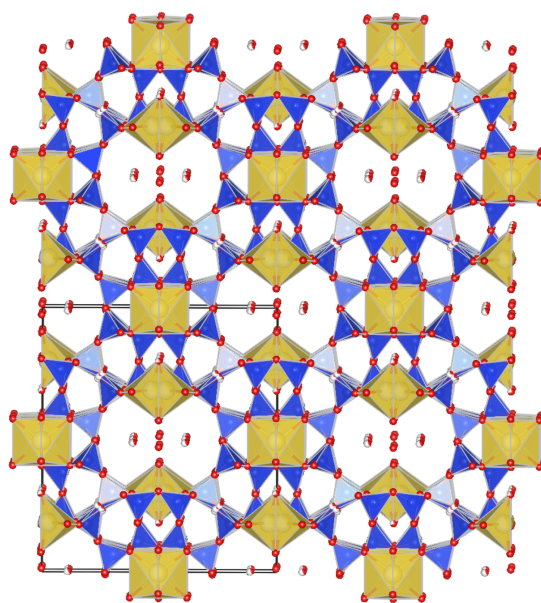
Питання до класу

Що спільного між графітом і слюдою? *Відповідь:* обидва мають *шарувату* структуру з міцними зв'язками всередині шару й слабкими між шарами. Тому обидва легко розщеплюються вздовж шарів і обидва використовуються як мастила (графіт — сухе мастило, слюда — наповнювач мастил). Структурна логіка та сама, хоча хімія зовсім різна.

6.4. Морденіт: кристал із дірками



Голчасті кристали морденіту



Канали вздовж осі c

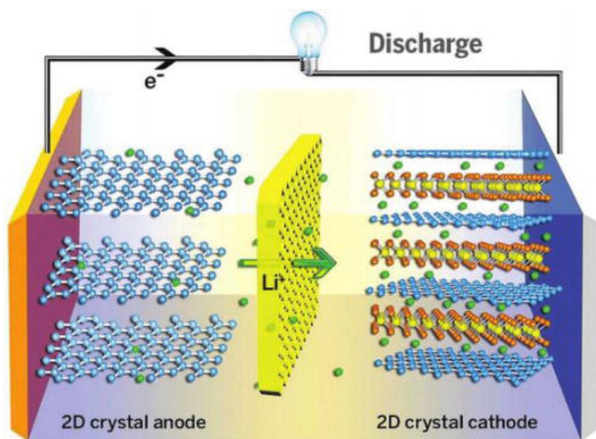
Рис. 14. Морденіт — природний **цеоліт**. У його каркасі є наскрізні канали діаметром близько 7 Å, у яких сидять молекули води та обмінні катіони.

Цеоліти — це «молекулярні сита»: канали пропускають молекули менші за певний розмір і затримують більші. Практичне застосування: осушення газів, пом'якшення води, каталізатори нафтопереробки, наповнювачі котячих туалетів, поглинання радіонуклідів (зокрема, цеоліти застосовували для очищення води після аварії на ЧАЕС).

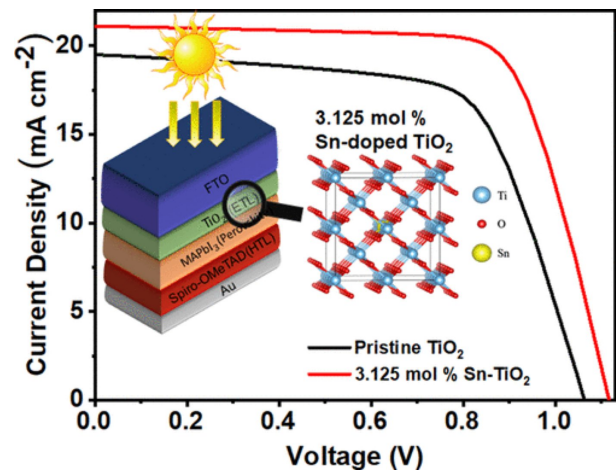
Порада

Морденіт — найефектніша структура з усієї папки для демонстрації на проекторі. Відкрийте `Mordenite.cif`, натисніть кнопку «вигляд уздовж осі c » і збільште межі рисунка до $2 \times 2 \times 1$ комірки — канали стануть видно буквально як дірки у стільниках.

6.5. Новітні матеріали в енергетиці



Літій-йонна батарея на 2D-кристалах



Перовскітна сонячна комірка з TiO_2

Рис. 15. Кристалографія в сучасній енергетиці. Ліворуч: йони Li^+ рухаються між шарами 2D-кристалів — це та сама шарувата логіка, що й у графіті. Праворуч: легування TiO_2 оловом змінює структуру й підвищує ККД сонячної комірки.

Головна думка для завершення теоретичної частини: *інженери сьогодні не шукають матеріали, а проєктують їх* — задають потрібну кристалічну структуру, а потім підбирають спосіб її отримати. Кристалографія з описової науки перетворилася на інструмент конструювання.

ЧАСТИНА II. РОБОТА У ПРОГРАМІ VESTA

7. Що таке VESTA і де її взяти

VESTA (*Visualization for Electronic and STructural Analysis*) — програма для тривимірної візуалізації кристалічних структур, розподілів електронної густини та форм кристалів. Автори — **Koichi Momma** та **Fujio Izumi** (Японія).

Сайт	https://jp-minerals.org/vesta/en/
Завантаження	https://jp-minerals.org/vesta/en/download.html
Ліцензія	безкоштовна для освітніх, наукових і некомерційних цілей
Платформи	Windows, macOS (Intel та Apple Silicon), Linux
Розмір	приблизно 20–25 МБ, інсталяція не потрібна
Стабільна версія	3.5.8
Версія в розробці	3.90.x (нові можливості, зокрема квазікристали)

7.1. Встановлення

Windows

Завантажте VESTA-win64.zip. **Обов'язково розпакуйте архів** у звичайну папку (наприклад, C:\VESTA) — запуск «усередині» zip-архіву не спрацює. Запустіть VESTA.exe. Інсталятора немає: програма портативна, її можна носити на флешці й роздати учням разом із файлами.

macOS

Завантажте VESTA.dmg, відкрийте образ і перетягніть вміст у теку /Applications. При першому запуску macOS може попередити, що застосунок від невідомого розробника — відкрийте його через контекстне меню (правий клік → **Відкрити**).

Linux

Розпакуйте VESTA-gtk3-x86_64.tar.xz і запустіть виконуваний файл VESTA. Потрібні GTK 3.24+ та бібліотеки Mesa OpenGL.

Якщо в школі є проблеми з правами адміністратора

VESTA не потребує встановлення й не пише в системні теки. Достатньо скопіювати розпаковану папку на робочий стіл або на флешку. Це головна причина, чому саме ця програма підходить для шкільного комп'ютерного класу.

Як цитувати

Якщо зображення з VESTA потрапляє в публікацію, статтю МАН чи презентацію на конкурс, ліцензія вимагає посилання:

K. Momma and F. Izumi, «VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data», J. Appl. Crystallogr., 44, 1272–1276 (2011).

Це також чудова нагода навчити учнів правильно посилатися на програмне забезпечення.

8. Файли CIF: звідки беруться структури

CIF (*Crystallographic Information File*) — міжнародний текстовий формат для опису кристалічної структури. Його можна відкрити звичайним Блокнотом — і це варто зробити на уроці хоча б раз: учні бачать, що за красивою 3D-картинкою стоїть простий і читабельний текст.

Фрагмент файлу alpha_quartz.cif із папки воркшопу

```

_symmetry_space_group_name_H-M   P3_121      ← просторова група
_cell_length_a                   4.91496618    ← ребро a, ангстрєми
_cell_length_b                   4.91496618
_cell_length_c                   5.43130114
_cell_angle_alpha                90.0          ← кути комірки
_cell_angle_beta                90.0
_cell_angle_gamma               120.0
_cell_volume                     113.62544098   ← об'єм комірки, Å³
_cell_formula_units_Z            3              ← скільки SiO₂ у комірці
loop_
_atom_site_label _atom_site_fract_x
_atom_site_fract_y _atom_site_fract_z
Si0  0.52684  0.00000  0.33333              ← дробові координати
O1   0.41347  0.26619  0.21358

```

Отже, весь опис структури — це шість чисел комірки, символ симетрії та координати кількох атомів. Решту (усі інші атоми, зв'язки, поліедри) VESTA добудовує сама за операціями симетрії.

8.1. Безкоштовні бази кристалічних структур

База	Що містить	Доступ
COD	Crystallography Open Database, понад 500 тис. структур	вільний
AMCSD	American Mineralogist Crystal Structure Database, мінерали	вільний
Materials Project	розраховані структури, багато гіпотетичних	реєстрація
IZA Database	структурні типи цеолітів	вільний
ICSD	найповніша база неорганіки	платний

- COD: <https://www.crystallography.net/cod/>
- AMCSD: <https://www.rruff.net/amcsd/>
- Materials Project: <https://next-gen.materialsproject.org/>
- Цеоліти: <https://www.iza-structure.org/databases/>

Для допитливих учнів

AMCSD — найзручніша база для шкільних проєктів: пошук за назвою мінералу, файл завантажується одним кліком. Запропонуйте учням знайти й відкрити структуру мінералу, названого на честь українського вченого, або мінералу зі свого регіону — це гарна тема для індивідуального дослідження.

9. Інтерфейс головного вікна

Після запуску та відкриття файлу вікно VESTA складається із семи частин. Варто показати їх класу один раз повільно — далі учні орієнтуються самі.

Табл. 5. Складові головного вікна VESTA

Частина	Призначення
Рядок меню	File, Edit, View, Objects, Utilities, Help. У macOS меню розташоване вгорі екрана, а не вікна.
Горизонтальна панель	Вигляд уздовж осей a, b, c (і a^*, b^*, c^*); покрокове обертання навколо x, y, z ; зсув; масштаб; Fit to screen .
Вертикальна панель	Режими роботи мишею: Rotate, Select, Translate, Magnify , а також вимірювання відстані, кута, двогранного та міжгранного кута.
Бічна панель	Три вкладки: Tools (налаштування поточного режиму миші), Style (стиль відображення) і Objects (перелік фаз і об'єктів).
Рядок стану	Короткий однорядковий підказ: назви атомів, довжина зв'язку тощо.
Графічна область	Власне тривимірна картинка.
Текстова область	Вкладки Output (детальний звіт про кожну дію), Summary (параметри комірки, просторова група, об'єм) і Comment .

Найкорисніша вкладка для уроку

Summary у текстовій області внизу. Там одразу написано: назва, просторова група з номером, a, b, c , кути й об'єм комірки. Усе, що потрібно заповнити в робочому аркуші, береться саме звідти — учням не треба шукати дані в інших місцях.

10. Перші сім кроків: повний цикл роботи

Цей алгоритм варто показати на проєкторі один раз цілком, а потім роздати учням як картку. Далі всі завдання — це повторення тих самих семи кроків з іншими файлами.

Базовий алгоритм

1. **Відкрити файл.** **File** → **Open...** (**Ctrl**+**O**) або просто перетягнути *.cif у вікно програми.
2. **Вписати в екран.** **View** → **Fit to Screen** або кнопка на горизонтальній панелі. Якщо структура «загубилася» — це завжди перший порятунок.
3. **Обрати стиль.** Бічна панель → вкладка **Style** → **Ball-and-stick** / **Space-filling** / **Polyhedral** (те саме є в меню **Objects** → **Structural Model**).
4. **Задати межі рисунка.** **Objects** → **Boundary...** (**Ctrl**+**Shift**+**B**). Наприклад, від 0 до 2 по x і y — побачите 2×2 комірки.
5. **Перевірити зв'язки.** **Edit** → **Bonds...** (**Ctrl**+**B**), якщо зв'язків не видно або їх забагато.
6. **Виміряти.** Режим **Distance** (клавіша **d**) або **Angle** (**a**) на вертикальній панелі — і клікнути по атомах. Результат з'явиться в рядку стану й у вкладці **Output**.
7. **Зберегти картинку.** **File** → **Export Raster Image...** (PNG, JPEG, TIFF) — для звіту, презентації або робочого аркуша.

11. Керування: миша і клавіатура

Табл. 6. Дії мишею у графічній області

Режим (вертикальна панель)	Що робить перетягування лівою кнопкою
Rotate (r)	обертає модель; вісь обертання перпендикулярна до напрямку руху миші
Translate (t)	зсуває модель у площині екрана
Magnify (m)	рух угору — збільшення, вниз — зменшення
Select (s)	виділяє атом, зв'язок або поліедр; протягування виділяє все в прямокутнику
Distance (d)	виміряти відстань між двома атомами
Angle (a)	виміряти кут між трьома атомами

Табл. 7. Найкорисніші сполучення клавіш

Ctrl + O	відкрити файл
Ctrl + S	зберегти як *.vesta (зі всіма налаштуваннями вигляду)
Ctrl + B	діалог Bonds (зв'язки та поліедри)
Ctrl + Shift + B	діалог Boundary (межі рисунка)
Ctrl + Shift + O	діалог Orientation (напрямок погляду)
Ctrl + Shift + P	діалог Properties (кольори, радіуси)
Ctrl + Shift + A	діалог Overall Appearance (фон, освітлення)
r / t / m / s / d / a	швидка зміна режиму миші
Стрілки	покрокове обертання навколо x та y
Ctrl + стрілки вгору/вниз	обертання навколо z
Delete	сховати виділені об'єкти
Esc	повернути всі сховані об'єкти

Пара «Delete – Esc» — недооцінений прийом

Виділіть кілька поліедрів і натисніть **Delete** — вони зникнуть (насправді лише сховаються). Так можна «розрізати» структуру й показати, що всередині, або змішати поліедричну модель із кульково-стрижневою. **Esc** повертає все назад. Це дуже ефектно виглядає на проекторі й займає дві секунди.

12. Стилi відображення: який коли обирати

Табл. 8. Стилi структурної моделі (**Style** або **Objects** → **Structural Model**)

Стиль	Що показує	Коли використовувати
Ball-and-stick	кульки-атоми та стрижні-зв'язки	універсальний; стиль за замовчуванням, найкращий для підрахунку сусідів
Space-filling	атоми як сфери реального радіуса	щоб показати щільність укладки та порожнини; добре для порівняння алмазу й графіту
Polyhedral	координаційні многогранники	силікати, оксиди: одразу видно тетраедри SiO ₄ й октаедри; головний стиль для мінералогії
Wireframe	лише лінії зв'язків	великі комірки, каркаси цеолітів
Stick	стрижні без кульок	органічні та молекулярні кристали
Dot surface	зовнішня поверхня атомів крапками	щоб побачити атоми крізь поверхню

Міні-експеримент на 2 хвилини

Відкрийте `Diamond.cif` і по черзі перемкніть **Ball-and-stick** → **Space-filling**. Запитайте: де в алмазі порожнє місце? (Майже немає — тому він такий густий і твердий.) Потім зробіть те саме з `Mordenite.cif` — контраст приголомшливий.

13. Межі рисунка: скільки комірок показувати

Файл CIF описує *одну* комірку. Щоб побачити структуру як структуру, а не як жменьку атомів, треба показати кілька комірок.

Objects → **Boundary...** (**Ctrl** + **Shift** + **B**) відкриває діалог із діапазонами *дробових* координат:

$x(\min) = 0$	$x(\max) = 2$	дві комірки вздовж a
$y(\min) = 0$	$y(\max) = 2$	дві комірки вздовж b
$z(\min) = 0$	$z(\max) = 1$	одна комірка вздовж c

Увага

Зміна меж **перебудовує всі атоми наново** й скидає всі індивідуальні налаштування: сховані об'єкти повертаються, виділення знімається, кольори окремих атомів повертаються до типових. Тому спершу задавайте межі, а *потім* наводьте красу.

Розумні межі для наших файлів

- `Diamond.cif`, `Fluorite(CaF2).cif`: $2 \times 2 \times 2$
- `Graphite.cif`: $3 \times 3 \times 2$ (щоб було видно кілька шарів)
- `Mordenite.cif`, `Cordierite.cif`: $2 \times 2 \times 1$ і погляд уздовж c
- `Lepidolite.cif`: $3 \times 3 \times 1$ і погляд уздовж b (щоб шари були «в профіль»)

14. Зв'язки та координаційні поліедри

Це найважливіший інструмент для мінералогії — і найчастіше джерело запитань учнів на кшталт «а чому в мене нічого не видно?».

Edit → **Bonds...** (**Ctrl**+**B**) відкриває список правил пошуку зв'язків. Кожне правило — це відповідь на питання «між якими атомами і на якій відстані вважати, що є зв'язок».

Табл. 9. Параметри діалогу **Bonds**

A1, A2	хімічні символи пари атомів (наприклад, Si та O)
Min. length	мінімальна довжина зв'язку, зазвичай 0
Max. length	максимальна довжина; головний параметр, який доводиться підбирати. Для Si – O це приблизно 1,8 Å, для Ca – O — 2,6 Å
Search A2 bonded to A1	шукати атоми A2 біля атомів A1
Search atoms bonded to A1	шукати будь-які атоми біля A1
Search molecules	шукати всі пари підряд — для молекулярних кристалів (лід, органіка)
Show polyhedra	будувати координаційний поліедр із центром на атомі A1

Як зробити гарні тетраедри SiO₄ за 30 секунд

1. **Ctrl**+**B** → кнопка **New**.
2. A1 = **Si**, A2 = **O**.
3. Min. length = 0, Max. length = **1.8**.
4. Режим: **Search A2 bonded to A1**.
5. Увімкнути прапорець **Show polyhedra**.
6. Режим меж: **Search additional atoms if A1 is included in the boundary** — щоб тетраедри на краю рисунка не виявилися «обрізними».
7. **OK**, потім **Style** → **Polyhedral**.

Те саме працює для Al – O (макс. 2,0 Å), Ca – O (2,6 Å), Fe – O (2,3 Å), Mg – O (2,3 Å).

Три типові проблеми зі зв'язками

- **Зв'язків немає взагалі** — максимальна довжина замала. Збільште **Max. length** на 0,2–0,3 Å.
- **Зв'язків забагато, все схоже на клубок** — навпаки, зavelика. Зменште.
- **Поліедри обрізані на краю** — змініть режим меж на **Search additional atoms if A1 is included in the boundary**.

15. Напрямок погляду та площини

Половина краси кристалічної структури видно лише під правильним кутом.

- **Швидко**: кнопки на горизонтальній панелі — вигляд уздовж осей a , b , c (і уздовж a^* , b^* , c^*). Це найчастіша дія на уроці.
- **Точно**: **Objects** → **Orientation...** (**Ctrl**+**Shift**+**O**) — можна задати напрямок проєктування як вектор $[uvw]$ або як нормаль до площини (hkl) .
- **Показати площину**: **Edit** → **Lattice Planes...** — додає видиму площину із заданими індексами Міллера та відстанню від початку координат.

Індекси Міллера без формул

Площину (hkl) найпростіше пояснити так: числа h, k, l показують, на скільки частин площина розрізає ребра комірки a, b, c . Площина (100) відсікає a в одній точці й паралельна b і c ; площина (111) навскіс перетинає всі три осі.

Покажіть це на Diamond.cif: додайте площину (111) — і скажіть, що саме вздовж неї алмаз розколюється, і саме цим користуються гранувальники.

16. Вимірювання відстаней і кутів

Цей розділ перетворює VESTA з «красивої картинки» на *вимірювальний прилад* — і саме це робить урок уроком фізики, а не малювання.

Відстань

Режим **Distance** ($\square$), клікнути по двох атомах. У рядку стану й у вкладці **Output** з'явиться довжина в ангстремах.

Кут

Режим **Angle** ($\square$), клікнути по трьох атомах; вершиною кута буде другий обраний атом.

Двогранний кут

Режим **Dihedral angle**, чотири атоми.

Швидко про один об'єкт

У режимі **Select** ($\square$) клікніть по атому — у **Output** з'явиться його назва, дробові координати, заселеність, кратність позиції та символ Вайкофа. Клік по зв'язку одразу дає його довжину.

Поліедр цілком

Клікніть по грані поліедра — VESTA виведе довжини всіх зв'язків, об'єм поліедра, індекс спотворення та дисперсію кутів.

Готові числа для перевірки на уроці

Ці значення можна заздалегідь записати на дошці — учні перевірять власні вимірювання:

Що міряємо	Файл	Очікуване значення
C – C в алмазі	Diamond.cif	$\approx 1,54 \text{ \AA}$
C – C у шарі графіту	Graphite.cif	$\approx 1,42 \text{ \AA}$
Відстань між шарами графіту	Graphite.cif	$c/2 \approx 3,9 \text{ \AA}$
Si – O у кварці	alpha_quartz.cif	$\approx 1,61 \text{ \AA}$
Кут O – Si – O	alpha_quartz.cif	$\approx 109^\circ$ (тетраедр)
Ca – F у флюориті	Fluorite(CaF2).cif	$\approx 2,39 \text{ \AA}$
C – O у групі CO ₃	Calcite(CaCO3).cif	$\approx 1,28 \text{ \AA}$

17. Оформлення та експорт

Кольори й радіуси атомів

Objects → **Properties...** ($\square$), вкладка **Atoms**. Там же — налаштування зв'язків і поліедрів (зокрема прозорість, дуже корисна, щоб показати, що всередині поліедра).

Фон і освітлення

View → **Overall Appearance...** ($\square$). Для друку ставте білий фон, для проєктора — темний: контраст помітно кращий у затемненому класі.

Проекція

View → **Parallel** або **Perspective**. Для наукових рисунків використовують паралельну, для «вау-ефекту» — перспективну: канали цеоліту в ній виглядають як справжні тунелі.

Растрове зображення

File → **Export Raster Image...** — PNG, JPEG, BMP, TIFF. Можна задати збільшений масштаб, щоб отримати картинку високої роздільності для друку.

Векторне зображення

File → **Export Vector Image...** — для публікацій.

Зберегти стан

File → **Save As...** у форматі *.vesta зберігає усе: орієнтацію, стиль, кольори, межі, зв'язки.

Найцінніша порада для вчителя

Підготуйте вдома по одному файлу *.vesta для кожного завдання — з уже налаштованими межами, поліедрами й потрібним кутом погляду. На уроці учні відкривають готовий вигляд за секунду замість того, щоб п'ять хвилин крутити модель. Час уроку економиться колосально, а учні все одно навчаються налаштовувати самі — на тих завданнях, де це і є мета.

18. Типові проблеми і як їх розв'язати

Табл. 10. Швидка діагностика

Симптом	Що робити
Екран порожній після відкриття	View → Fit to Screen . Найчастіше модель просто поза кадром.
Видно лише кілька атомів	Збільшити межі: Ctrl + Shift + B , поставити 0–2 по x і y .
Зв'язків немає	Ctrl + B , збільшити Max. length або додати нове правило.
Поліедри «обрізані»	У Bonds обрати режим меж Search additional atoms if A1 is included in the boundary .
Не видно атомів водню	Вони дуже маленькі. Збільшити радіус у Properties → Atoms або додати правило зв'язку O – H з максимумом 1,2 Å.
Картинка «рвана», артефакти	Увімкнути View → Antialiasing ; на слабких відеокартах — навпаки, вимкнути.
Програма не запускається (Windows)	Архів не розпаковано. Розпакуйте zip у звичайну папку.
macOS не дозволяє відкрити	Правий клік на застосунку → Відкрити → підтвердити.
Усе зникло після зміни меж	Так і має бути: зміна меж скидає індивідуальні налаштування. Спершу межі — потім оформлення.
Випадково сховали пів структури	Esc повертає всі сховані об'єкти.

ЧАСТИНА ІІІ. ПЛАН УРОКУ

19. Паспорт уроку

Тема	Кристалічна будова речовини: як внутрішній порядок визначає властивості
Клас	10–11
Предмет	Фізика або хімія; оптимально — інтегрований урок
Тип уроку	Урок засвоєння нових знань із практичною роботою на комп'ютері
Тривалість	45 хвилин (базовий варіант) або 90 хвилин (воркшоп)
Технології	Робота з науковим програмним забезпеченням, дослідження в парах, навчання на станціях

19.1. Мета

Навчальна

Сформувати поняття кристалічної ґратки, елементарної комірки, операції симетрії, сингонії, поліморфізму; показати на прикладах, що властивості речовини є наслідком її будови.

Розвивальна

Розвивати просторову уяву, вміння працювати з тривимірною моделлю, знімати дані вимірювань і порівнювати їх, робити висновок із власноруч отриманих чисел.

Виховна та профорієнтаційна

Показати, що матеріалознавство — жива наука, якою займаються в Україні; познайомити з реальним науковим інструментом, яким користуються дослідники в усьому світі.

19.2. Очікувані результати

Після уроку учень/учениця:

- пояснює різницю між кристалічним і аморфним тілом;
- розрізняє поняття «елементарна комірка», «кристалічна ґратка», «просторова група»;
- наводить приклади операцій симетрії й пояснює, чому в кристалах немає п'ятикратної осі;
- на конкретних прикладах пояснює зв'язок будови й властивостей (алмаз/графіт, шаруватість/спайність, пористість/сорбція);
- самостійно відкриває файл CIF у VESTA, змінює стиль відображення, задає межі рисунка та вимірює міжатомну відстань;
- робить обґрунтований висновок на підставі власних вимірювань.

19.3. Ключові поняття

Кристал · аморфне тіло · елементарна комірка · кристалічна ґратка · базис · операція симетрії · вісь обертання · площина дзеркала · сингонія · просторова група · координатне число · координатний поліедр · поліморфізм · алотропія · анізотропія · спайність · фазова діаграма

19.4. Обладнання та підготовка вчителя напередодні

1. Перевірити, що VESTA встановлена й запускається на всіх учнівських комп'ютерах (див. розділ 7).

2. Скопіювати папку з файлами *.cif на кожен комп'ютер або на спільний мережевий диск.
3. Підготувати файли *.vesta з готовими налаштуваннями для станцій, де налаштування не є метою завдання.
4. Роздрукувати робочий аркуш (додаток Б) — по одному на пару.
5. За можливості — принести зразки: кварц, кальцит (бажано прозорий), слюду, графіт (можна стрижень олівця), шматочок скла.

20. Хронометраж: базовий урок (45 хвилин)

Час	Етап	Зміст діяльності
0–3 хв	Організація й гачок	Учитель кладе прозорий кальцит на аркуш із написом — напис роздвоюється. Питання: «Чому?» Відповідь відкладається на кінець уроку.
3–8 хв	Актуалізація	Фронтальна бесіда: чим тверде тіло відрізняється від рідини; чи все тверде є кристалічним; скло — кристал чи ні. Вводиться поняття дальнього порядку.
8–18 хв	Новий матеріал	Комірка та ґратка; шість параметрів комірки; симетрія (метелик, коло, п'ятикутники, які не вимощують площину); сім сингоній. Демонстрація зображень із презентації.
18–23 хв	Демонстрація VESTA	Учитель на проекторі показує повний цикл із семи кроків на файлі Diamond.cif: відкрити, вписати, стиль, межі, зв'язки, виміряти C – C, експорт.
23–38 хв	Практична робота	Учні в парах виконують станцію 1 (обов'язкова) і за вибором одну зі станцій 2–5. Учитель ходить між робочими місцями.
38–43 хв	Обговорення	Кожна пара називає одне число, яке виміряла, і один висновок. Повернення до гачка: тепер учні пояснюють кальцит самі.
43–45 хв	Підсумок	Головна теза уроку одним реченням; домашнє завдання.

20.1. Розширений варіант (90 хвилин, воркшоп)

Час	Зміст
0–10 хв	Гачок і актуалізація (як вище, але з роздаванням зразків мінералів по партах)
10–25 хв	Теорія: комірка, симетрія, сингонії
25–35 хв	Демонстрація VESTA вчителем
35–40 хв	Станція 1 (усі разом, синхронно з учителем)
40–65 хв	Станції 2–5: кожна пара проходить дві станції на вибір
65–75 хв	Поліморфізм і фазові діаграми: вода та SiO ₂ ; історія стишовіту й метеоритних кратерів
75–85 хв	Міні-презентації: кожна пара за 60 секунд показує свою найкращу картинку з VESTA на проекторі й пояснює, що на ній видно
85–90 хв	Підсумок, матеріали з пам'яттю форми як «що далі», домашнє завдання

21. Детальний хід уроку

21.1. Гачок (3 хвилини)

Найкращий варіант — прозорий кальцит на аркуші з текстом. Якщо кальциту немає, працює демонстрація з презентації (рис. 16) або проста альтернатива: показати грифель олівця й

обручку з діамантом і сказати, що це *одна й та сама речовина*.



Рис. 16. Гачок уроку: прозорий кальцит роздвоює напис. Учні мають пояснити це явище наприкінці уроку самостійно.

21.2. Актуалізація (5 хвилин)

Питання для фронтальної бесіди

1. Назвіть три тверді тіла. Чи всі вони влаштовані однаково всередині?
2. Чому кухонна сіль завжди утворює кубики, а цукор — ні?
3. Скло тверде. Чи є воно кристалом?
4. Що спільного між сніжинкою й кристалом кварцу?

Висновок етапу, який варто записати на дошці: *кристал = дальній порядок = періодичне повторення однакового фрагмента*.

21.3. Пояснення нового матеріалу (10 хвилин)

Логіка викладу — від видимого до невидимого:

1. **Форма кристала — наслідок, а не причина.** Показати фото кварцу, льоду, алмазу і одразу під ними — їхні структури.
2. **Найменший повторюваний фрагмент.** Ввести елементарну комірку і шість її параметрів. Аналогія: шпалери, кахлі, вишиванка — учні мають самі назвати «мотив, що повторюється».
3. **Симетрія.** Метелик, долоні, коло, безформна пляма. Перейти до осей обертання. Обов'язково — вправа з п'ятикутниками.
4. **Класифікація.** Сім сингоній. Не вимагати запам'ятовування — достатньо розуміння принципу: класифікують за співвідношеннями між ребрами й кутами.
5. **Головна теза.** Однакові атоми + різна структура = різні властивості. Алмаз і графіт.

21.4. Демонстрація VESTA (5 хвилин)

Показувати повільно, називаючи вголос кожну дію. Учні *не* повторюють одночасно — вони дивляться. Повторять на станції 1.

Сценарій демонстрації на файлі Diamond.cif

1. Перетягнути файл у вікно VESTA. «Ось одна елементарна комірка алмазу».
2. Покрутити мишею. «Це не картинка, це справжня тривимірна модель».
3. Показати вкладку **Summary**: «Просторова група $Fd\bar{3}m$, $a = 3,56$ ангстрема. Це і є те, що визначили рентгеном».
4. **Ctrl** + **Shift** + **B**, поставити 0–2 по всіх осях. «А тепер це вже вісім комірок — видно, що структура нескінченна».
5. **Style** → **Space-filling**: «Місця майже не лишилося. Ось чому алмаз найтвердіший».
6. Повернутися до **Ball-and-stick**, натиснути **[d]**, клікнути по двох сусідніх атомах: «1,54 ангстрема. Ми щойно виміряли довжину хімічного зв'язку».
7. **File** → **Export Raster Image**: «Таку картинку можна вставити в презентацію чи роботу МАН».

21.5. Підсумок уроку (2 хвилини)

Попросіть клас сформулювати головну думку уроку одним реченням. Цільове формулювання: *«Властивості речовини визначаються не тільки тим, з яких атомів вона складається, а насамперед тим, як ці атоми розташовані».*

Фінальний акцент: саме тому інженери сьогодні не лише шукають нові речовини, а й *проектують структури* з наперед заданими властивостями — акумулятори, сонячні панелі, сплави з пам'яттю форми.

22. Практичні станції

Кожна станція розрахована на 7–10 хвилин роботи в парі. Усі файли лежать в одній папці. Учні записують результати в робочий аркуш (додаток Б).

Станція 1 (обов'язкова). Один елемент — дві речовини**Файли: Diamond.cif, Graphite.cif**

1. Відкрийте Diamond.cif. Натисніть **Fit to Screen**.
2. Задайте межі 0–2 по x , y , z (**Ctrl** + **Shift** + **B**).
3. Порахуйте, зі скількома сусідами зв'язаний один атом вуглецю. Запишіть.
4. Режим **Distance** (**[d]**): виміряйте відстань C – C. Запишіть.
5. Відкрийте Graphite.cif, межі 0–3, 0–3, 0–2.
6. Порахуйте сусідів одного атома *в межах шару*. Виміряйте C – C у *шарі* і відстань *між шарами*.
7. Перемкніть обидві структури у **Space-filling** і порівняйте, де більше порожнього місця.

Питання станції 1

1. У скільки разів відстань між шарами графіту більша за відстань C – C у шарі?
2. Де зв'язок міцніший — усередині шару чи між шарами? Звідки це видно з чисел?
3. Поясніть, чому олівець пише, а алмаз ріже скло.
4. Графіт проводить струм уздовж шарів, але погано — поперек. Чому?

Станція 2. Поліморфи SiO_2 : тиск стискає структуру

Шість поліморфів SiO_2

Файли: `alpha_quartz.cif`, `beta_quartz.cif`, `Tridymite.cif`, `alpha_cristobalite.cif`, `Coesite.cif`, `Stishovite.cif`.

1. Відкривайте файли по черзі. Для кожного випишіть із вкладки **Summary**: просторову групу та об'єм комірки V .
2. Обчисліть об'єм, що припадає на одну формульну одиницю SiO_2 (V/Z ; значення Z подані в додатку A).
3. Для кожної структури побудуйте поліедри: `Ctrl+B`, $A1 = \text{Si}$, $A2 = \text{O}$, Max. length = 1,8 (для стишовіту — 1,9), прапорець **Show polyhedra**; потім **Style** → **Polyhedral**.
4. Порахуйте, скільки вершин має поліедр навколо кремнію в кожному випадку.
5. Обчисліть густину кожної форми за формулою $\rho = 1,6605 \cdot ZM/V$, де $M(\text{SiO}_2) = 60,08$, а V — у $\text{\AA}^3$. Розташуйте поліморфи в порядку зростання густини.

Один нюанс з файлом `Coesite.cif`

Це файл із бази SpringerMaterials, у якому міститься кілька наборів даних. Відкриваючи його, VESTA запитає, який блок завантажити. Оберіть **standardized_unitcell** (або **published_cell** — це та сама структура в іншій установці). Блок **niggli_reduced_cell** дає примітивну комірку вдвічі меншого об'єму, і тоді $Z = 8$, а не 16 — густина все одно вийде та сама, але учні можуть розгубитися.

Питання станції 2

1. У яких структур поліедр — тетраедр (4 вершини), а в якій — октаедр (6)?
2. Як змінюється об'єм на одну формульну одиницю від тридиміту до стишовіту? У скільки разів?
3. Коесит і стишовіт обидва утворюються за високих тисків. Чому густина стишовіту помітно більша, хоча обидва складаються з SiO_2 ?
4. Скориставшись фазовою діаграмою SiO_2 , поясніть, чому найщільніша структура утворюється за найбільших тисків.
5. Чому знахідка стишовіту в породі свідчить про удар метеорита?

Станція 3. Кальцит: чому зображення роздвоюється

Файл: `Calcite(CaCO3).cif`

1. Відкрийте файл, задайте межі 0–2, 0–2, 0–1.
2. Побудуйте поліедри навколо кальцію: $A1 = \text{Ca}$, $A2 = \text{O}$, Max. length = 2,6, **Show polyhedra**.
3. Додайте зв'язки C – O з максимумом 1,4 $\text{\AA}$.
4. Натисніть кнопку «вигляд уздовж осі a » на горизонтальній панелі. Замалюйте або опишіть, що бачите.
5. Тепер — «вигляд уздовж осі c ». Опишіть різницю.
6. Виміряйте відстань C – O у групі CO_3 .

Питання станції 3

1. Групи CO_3 — плоскі трикутники. Чи однаково вони орієнтовані? У який бік «дивляться» їхні площини?
2. Чи однаковий вигляд структури вздовж осі a і вздовж осі c ? Як називається властивість бути різним у різних напрямках?
3. Світло — це електромагнітна хвиля. Чому середовище, яке по-різному влаштоване в різних напрямках, по-різному сповільнює світло різної поляризації?
4. Параметри комірки кальциту: $a = b = 5,01 \text{ \AA}$, але $c = 16,99 \text{ \AA}$. Що це каже про форму структури?

Станція 4. Шари і спайність**Файли: Graphite.cif, Lepidolite.cif**

1. Відкрийте Lepidolite.cif, задайте межі 0–3, 0–3, 0–1.
2. Побудуйте поліедри: A1 = Si, A2 = O, максимум 1,8; додайте правило A1 = Al, A2 = O, максимум 2,0. Увімкніть **Polyhedral**.
3. Подивіться на структуру «в профіль»: вигляд уздовж осі b .
4. Знайдіть шар, у якому сидять великі атоми калію — саме там пакети з'єднані найслабше.
5. Порівняйте загальний вигляд із Graphite.cif у такій самій орієнтації.

Питання станції 4

1. Що спільного в будові графіту й слюди, попри цілком різний хімічний склад?
2. Спайність — здатність мінералу розколюватися по певних площинах. Уздовж якої площини розколюватиметься слюда? Чому саме там?
3. Слюда колись використовували замість скла у віконцях печей. Які дві властивості структури це пояснюють?
4. Чому у графіт, і слюду застосовують як мастила?

Станція 5. Кристал із дірками**Файл: Mordenite.cif**

1. Відкрийте файл. Задайте межі 0–2, 0–2, 0–1.
2. Побудуйте поліедри: A1 = Si, A2 = O, максимум 1,8; далі A1 = Al, A2 = O, максимум 2,0. Увімкніть **Polyhedral**.
3. Натисніть «вигляд уздовж осі c ».
4. Перемкніть на **Space-filling** — канали стануть ще виразнішими.
5. Режимом **Distance** виміряйте відстань між протилежними стінками каналу (від атома кисню до атома кисню навпроти).

Питання станції 5

1. Який приблизно діаметр каналу? Порівняйте з розміром молекули води (близько 2,8 Å).
2. Чи пройде крізь такий канал молекула води? А молекула олії (десятки ангстремів)?
3. Чому цеоліти називають «молекулярними ситами»?
4. Запропонуйте, де таку властивість можна використати на практиці.

Бонусні станції для тих, хто впорався швидше

Файл	Завдання
Ice_1h.cif	Побудуйте зв'язки O – H (максимум 1,2 Å) у режимі Search molecules , межі 0–3, 0–3, 0–2, далі — вигляд уздовж осі <i>c</i> . Знайдіть шестикутні канали в каркасі. Обчисліть густину льоду за формулою $\rho = 1,6605 ZM/V$ ($M(\text{H}_2\text{O}) = 18,02$, $Z = 4$, $V = 129,2 \text{ Å}^3$) і порівняйте з густиною води. Поясніть, чому лід плаває.
Fluorite(CaF2).cif	Поліедри навколо кальцію (максимум 2,6 Å). Порахуйте координаційні числа кальцію і фтору. Чому вони відносяться як 8:4 — і як це пов'язано з формулою CaF_2 ?
Goethite(FeHO2).cif Grouitit(MnHO2).cif	Відкрийте обидва. Порівняйте просторові групи й параметри комірок. Це різні мінерали з різними катіонами — але що в них однакове? (Вводиться поняття <i>ізоструктурності</i> .)
Cordierite.cif	Вигляд уздовж осі <i>c</i> , поліедри Si–O та Al–O. Знайдіть шестичленні кільця тетраedrів і канали в їх центрі. Це ті самі канали, що дають плеохроїзм.

23. Домашнє завдання

Три рівні на вибір учня — це дає змогу диференціювати навантаження без окремих завдань для кожного.

Рівень 1 (базовий)

Письмово відповісти на запитання: «Алмаз і графіт складаються з тих самих атомів. Поясніть щонайменше трьома реченнями, чому вони такі різні». Додати одну картинку, експортовану з VESTA на уроці.

Рівень 2 (основний)

Знайти в базі AMCSD або COD структуру будь-якого мінералу на власний вибір, відкрити її у VESTA, підготувати одне зображення і коротко (до 10 речень) описати: назва, формула, сингонія, просторова група, параметри комірки, одна цікава особливість будови.

Рівень 3 (поглиблений)

Порівняльне міні-дослідження: обрати два поліморфи однієї речовини (наприклад, SiO_2 або TiO_2), побудувати таблицю параметрів, обчислити густину з об'єму комірки та маси вмісту, порівняти з довідковими значеннями й пояснити розбіжність. Оформити як одну сторінку з рисунками.

24. Критерії оцінювання практичної роботи

Бали	Показники
1–3	Учень відкрив файл у VESTA й обертає модель. Робочий аркуш заповнений частково; числові дані відсутні або переписані в сусіда.
4–6	Самостійно змінює стиль відображення й межі рисунка. Робочий аркуш заповнений, вимірювання виконані, але висновок відсутній або формальний.
7–9	Упевнено виконує весь базовий алгоритм, включно з побудовою поліедрів. Вимірювання правильні, висновок сформульований і спирається на власні числа. Правильно вживає терміни.
10–12	Усе перелічене вище, а також: переносить висновок на новий приклад (наприклад, самостійно помічає, що лепідоліт «як графіт»), ставить власне дослідницьке запитання, помічає розбіжність між моделлю й довідковими даними і намагається її пояснити.

25. Типові труднощі учнів і як на них реагувати

Труднощі або хибне уявлення	Що допомагає
«Кульки і палички — це і є атоми та зв'язки»	Наголосити: це <i>модель</i> . Атоми не мають чітких меж, зв'язок — не паличка, а область підвищеної електронної густини. Перемкнути на Space-filling й обговорити, яка модель «правильніша».
Плутають елементарну комірку з молекулою	Показати, що атом на вершині комірки належить одразу восьми сусіднім коміркам. У кристалі немає окремих молекул — є нескінченний каркас.
«Ця структура несправжня, її намалювали»	Показати у файлі CIF рядки з реальними координатами й посилання на публікацію (у файлі <i>Lepidolite.cif</i> є прізвища авторів і рік — 1971).
Не бачать різниці між сингонією й просторовою групою	Сингонія — це форма «коробки»; просторова група — ще й повний набір правил симетрії всередині. Кілька різних груп можуть мати ту саму сингонію.
Губляться в тривимірній сцені, «все крутиться не туди»	Навчити двох кнопок: Fit to Screen і «вигляд уздовж осі <i>c</i> ». Цього достатньо, щоб завжди повернутися до впізнаваного вигляду.
Отримують «неправильні» числа під час вимірювання	Найчастіше клікнули не по тих атомах. Порадити спершу збільшити модель, а вже потім міряти.

Диференціація

Тим, кому важко: дайте готовий файл *.vesta з налаштованим виглядом — щоб уся увага пішла на спостереження й вимірювання, а не на налаштування програми.

Тим, кому легко: запропонуйте самостійно знайти структуру в базі COD, або обчислити густину з параметрів комірки й порівняти з довідником, або розібратися, що означає символ просторової групи по літерах.

ДОДАТКИ

А. Файли структур, що додаються до воркшопу

Табл. 11. Перелік файлів *.cif із параметрами комірок

Файл	Формула	Група	a, b, c (Å)	$V, \text{\AA}^3$	ρ^*
Diamond.cif	C	$Fd\bar{3}m$	3,561 · 3 (куб.)	45,1	3,53
Graphite.cif	C	$P6_3/mmc$	2,467; 2,467; 7,803	41,1	1,94
Ice_Ih.cif	H ₂ O	$P6_3/mmc$	4,506; 4,506; 7,346	129,2	0,93
Ice.cif	H ₂ O	$Cmc2_1$	4,327; 7,526; 7,068	230,1	1,04
alpha_quartz.cif	SiO ₂	$P3_121$	4,915; 4,915; 5,431	113,6	2,63
beta_quartz.cif	SiO ₂	$P6_422$	5,061; 5,061; 5,541	122,9	2,44
Tridymite.cif	SiO ₂	$P2_1$	4,931; 8,180; 5,005	177,6	2,25
alpha_cristobalite.cif	SiO ₂	$P4_12_12$	4,993; 4,993; 6,934	172,8	2,31
beta_cristobalite.cif	SiO ₂	$I4_12d$	4,955; 4,955; 7,311	179,5	2,22
Coesite.cif	SiO ₂	$C2/c$	7,050; 12,291; 7,032	532,5	3,00
Stishovite.cif	SiO ₂	$P4_2/mnm$	4,233; 4,233; 2,693	48,3	4,13
SiO2_huge.cif	SiO ₂	$C2/c$	24,885; 5,006; 24,325	2890,2	1,93
Calcite(CaCO ₃).cif	CaCO ₃	$R\bar{3}c$	5,007; 5,007; 16,990	368,8	2,70
Fluorite(CaF ₂).cif	CaF ₂	$Fm\bar{3}m$	5,516 · 3 (куб.)	167,8	3,09
Goethite(FeH ₂ O).cif	FeO(OH)	$Pnma$	9,967; 3,031; 4,604	139,1	4,24
Groutit(MnH ₂ O).cif	MnO(OH)	$Pnma$	10,623; 2,895; 4,557	140,2	4,17
Cordierite.cif	Mg ₂ Al ₄ Si ₅ O ₁₈	$Cccm$	9,830; 17,267; 9,440	1602,4	2,43
Lepidolite.cif	слюда 2M ₂	$C2/c$	9,032; 5,200; 20,150	933,0	—
Mordenite.cif	цеоліт	$Cmc2_1$	18,080; 20,380; 7,489	2759,3	—

* густина в г/см³, обчислена з об'єму комірки та вмісту, зазначеного у файлі

Кути, відмінні від 90°:

$\gamma = 120^\circ$ — Graphite, Ice_Ih, alpha_quartz, beta_quartz, Calcite;

$\beta = 119,1^\circ$ — Coesite; $\beta = 118,4^\circ$ — Tridymite;

$\beta = 107,5^\circ$ — SiO2_huge; $\beta = 99,8^\circ$ — Lepidolite.

Особливості окремих файлів, про які варто знати заздалегідь

Файли в папці мають різне походження: частину згенеровано теоретичним розрахунком (пакетом *runitgen* з бази Materials Project), частину взято з експериментальних баз (COD, SpringerMaterials). Це не вада матеріалу, а чудова нагода обговорити з учнями, звідки беруться структурні дані й де межі моделей.

- **Coesite.cif** (SpringerMaterials, за Angel, Shaw & Gibbs, 2003) містить кілька блоків даних, тому VESTA запитає, який завантажити. Беріть **standardized_unitcell** або **published_cell** — це одна й та сама структура в різних установках ($Z = 16$). Блок **ni-ggli_reduced_cell** — примітивна комірка вдвічі меншого об'єму ($Z = 8$); густина вийде та сама, але учнів це може збити з пантелику. Дані походять із дослідження стиснення коеситу, тож густина з файлу (3,00 г/см³) трохи перевищує довідкову за атмосферного тиску (2,91 г/см³).
- **Ice_Ih.cif** (COD 1538173, Goto, Hondoh & Mae, 1990) — справжній гексагональний лід Ih, група $P6_3/mmc$. Густина з файлу 0,93 г/см³, тож обчислення на бонусній станції дає правильний результат. *Важливо*: атоми водню в ньому мають заселеність 0,5. Це не помилка — у льоду Ih протони *невпорядковані*: кожна позиція зайнята половиною часу, а на кожному водневому зв'язку завжди сидить рівно один атом водню (правила льоду Бернала–Фаулера). У VESTA це виглядає як «піватоми» й зазвичай викликає запитання — варто підготувати відповідь заздалегідь.

- **Ice.cif** — упорядкований за протонами аналог (структурний тип льоду XI, група $Cmc2_1$) з розрахунку. Каркас той самий, атоми водню «цілі», але комірка стиснута, тож густина $1,04 \text{ г/см}^3$ завищена. Зручний як *унаочнення* каркаса; для обчислення густини беріть Ice_Th.cif.
- **Graphite.cif** дає міжшарову відстань $c/2 = 3,90 \text{ Å}$ замість експериментальних $3,35 \text{ Å}$, а густину $1,94$ замість $2,26 \text{ г/см}^3$. Причина типова: розрахунок погано описує слабку ван-дер-ваальсову взаємодію між шарами. *Якісний* висновок станції 1 (усередині шару зв'язок набагато коротший, ніж між шарами) залишається правильним.
- **SiO2_huge.cif** — каркасна форма SiO_2 з дуже великою коміркою ($V = 2890 \text{ Å}^3$, $Z = 56$) і густиною лише $1,93 \text{ г/см}^3$. Для основних завдань не потрібна, але може стати в пригоді як контраст: ось *наскільки* пухким буває каркас із тих самих тетраедрів SiO_4 , якщо з'єднати їх інакше.

Б. Робочий аркуш учня

КРИСТАЛІЧНІ СТРУКТУРИ У VESTA

Прізвища: _____ Клас: _____ Дата: _____

Частина 1. Алмаз і графіт

обов'язкова

	Алмаз	Графіт
Просторова група (вкладка Summary)	_____	_____
Параметр a , Å	_____	_____
Об'єм комірки V , Å ³	_____	_____
Кількість найближчих сусідів одного атома	_____	_____
Найкоротша відстань C – C, Å	_____	_____
Відстань між шарами, Å	—	_____
Де більше порожнього місця (Space-filling)?	_____	_____

Висновок: чому олівець пише, а алмаз ріже скло?

Частина 2. Моя станція: _____

Файл(и), з якими працював(ла): _____

Що я виміряв(ла) — число й одиниці:

Що я побачив(ла) в структурі (опис або схематичний рисунок):

Як будова пояснює властивість цієї речовини:

Частина 3. Одним реченням

Головна думка сьогоднішнього уроку:

Запитання, яке в мене залишилося:

В. Джерела та корисні посилання

Програма

- VESTA — сайт програми: <https://jp-minerals.org/vesta/en/>
- Повний посібник користувача (PDF та онлайн-версія): <https://jp-minerals.org/vesta/en/doc.html>
- K. Momma, F. Izumi. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *J. Appl. Crystallogr.*, 2011, **44**, 1272–1276.

Бази кристалічних структур

- Crystallography Open Database: <https://www.crystallography.net/cod/>
- American Mineralogist Crystal Structure Database: <https://www.ruff.net/amcsd/>
- Materials Project: <https://next-gen.materialsproject.org/>
- База структурних типів цеолітів: <https://www.iza-structure.org/databases/>
- Bilbao Crystallographic Server (симетрія, просторові групи): <https://www.cryst.ehu.es/>
- Mindat — найбільша база даних про мінерали: <https://www.mindat.org/>

Інтерактивні матеріали для уроку

- Фазові діаграми (Lumen Learning): <https://courses.lumenlearning.com/chemistryformajors/chapter/phase-diagrams-2/>
- Симуляція агрегатних станів речовини (PhET, Колорадський університет): https://phet.colorado.edu/sims/html/states-of-matter-basics/latest/states-of-matter-basics_all.html
- Подвійне променезаломлення: <https://www.le-comptoir-geologique.com/birefringence-glossary.html>
- Морденіт: <https://www.le-comptoir-geologique.com/mordenite-encyclopedia.html>
- Кордієрит на Mindat: <https://www.mindat.org/min-1128.html>

Джерела ілюстрацій, використаних у презентації

- Фазова діаграма SiO₂ — Royce, Baars & Viles, 2021.
- 2D-кристали в батареях — IntechOpen: <https://www.intechopen.com/chapters/69529>
- Сонячні елементи з легуванням TiO₂ — *J. Phys. Chem. C*: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.1c02302>