

Лекция 9

Топология кристаллических структур.
Топологические типы. Программы и базы
данных для анализа топологии.
Топологический дизайн

Что такое топология?

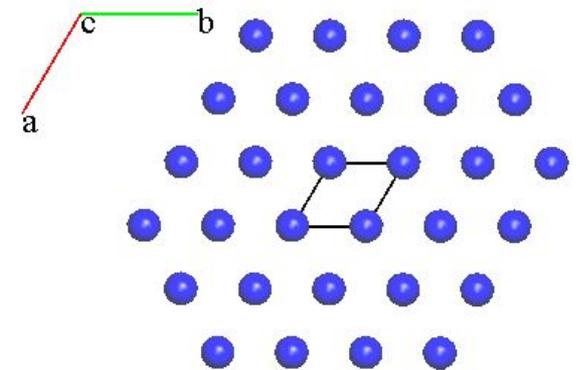
Строгое определение дается в общей топологии

$\{A_i\} \rightarrow$ множество объектов, образующих **топологическое пространство**

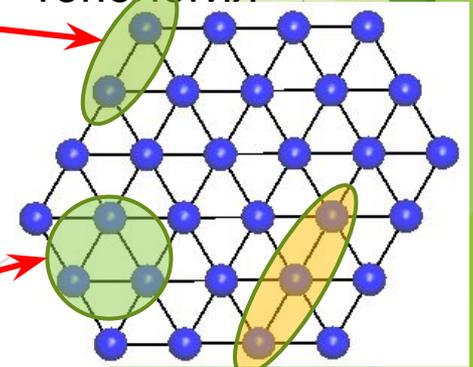
$\{(A_k, A_j, \dots)\} \rightarrow$ множество подмножеств топологических объектов - **топология**, заданная на топологическом пространстве

Эта топология есть набор связей

Эта топология есть набор тайлов



Тривиальная топология



А это что за топология?

Топологические объекты в кристаллохимии

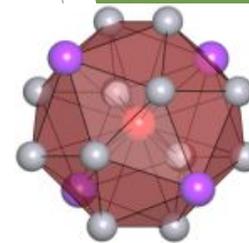
Атом



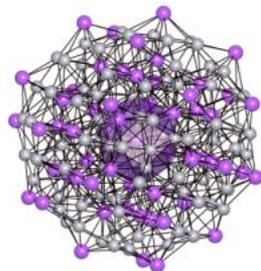
Межатомный контакт



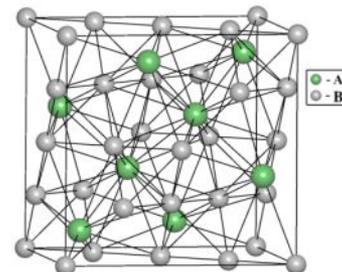
Координационный полиэдр



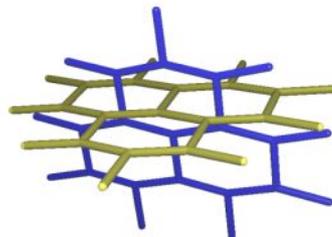
Структурная единица



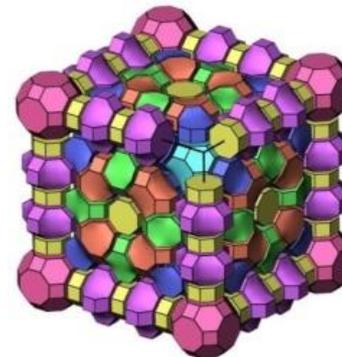
Атомная сетка



Переплетение атомных сеток

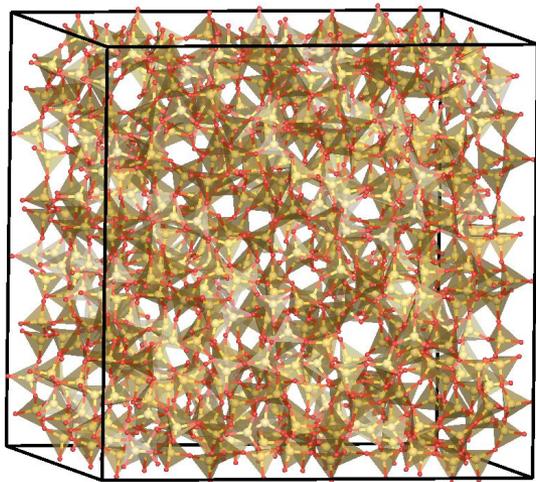


Тайл, тайлинг



Топологические представления

Паулингит, $\text{Na}[\text{AlSiO}_4]$



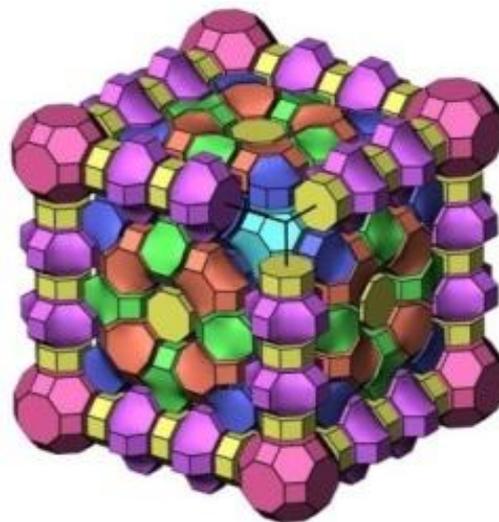
Полное представление (все атомы)



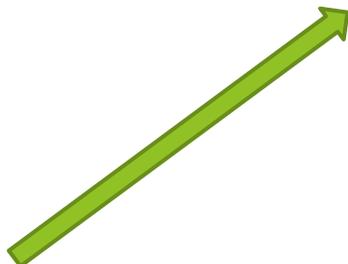
Каркас SiO_2 (без атомов Na)



T каркас (только атомы Si)



Тайлинг (Si полости)

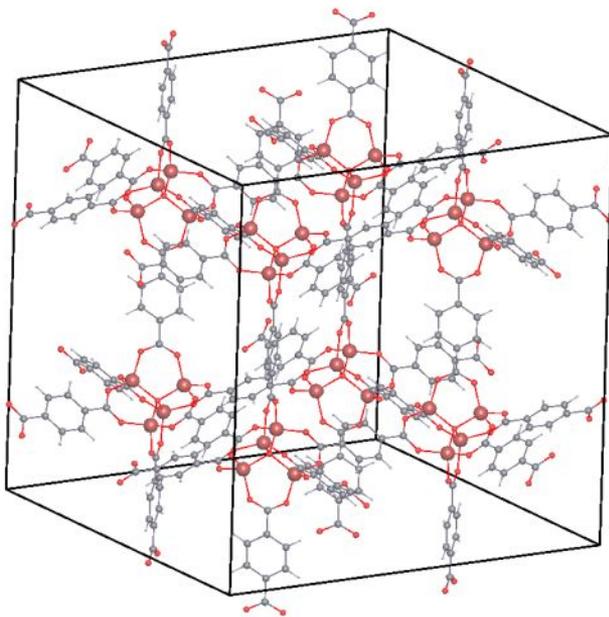


Базовая топология структуры

Design and synthesis of an exceptionally stable and highly porous metal-organic framework

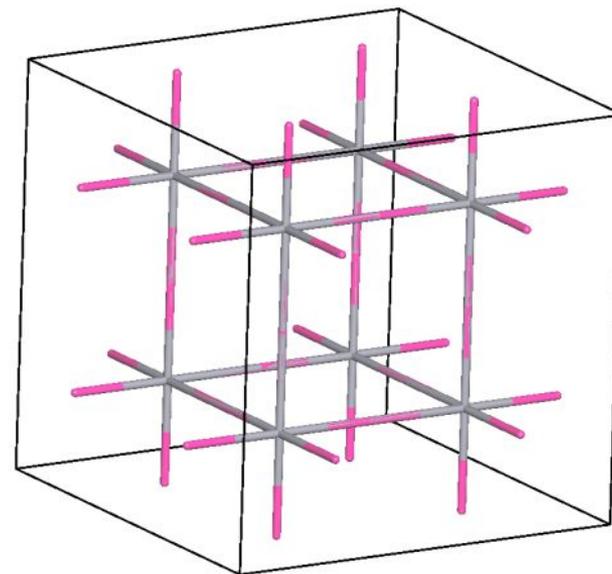
Hailian Li*, Mohamed Eddaoudi†, M. O’Keeffe* & O. M. Yaghi†

NATURE | VOL 402 | 18 NOVEMBER 1999



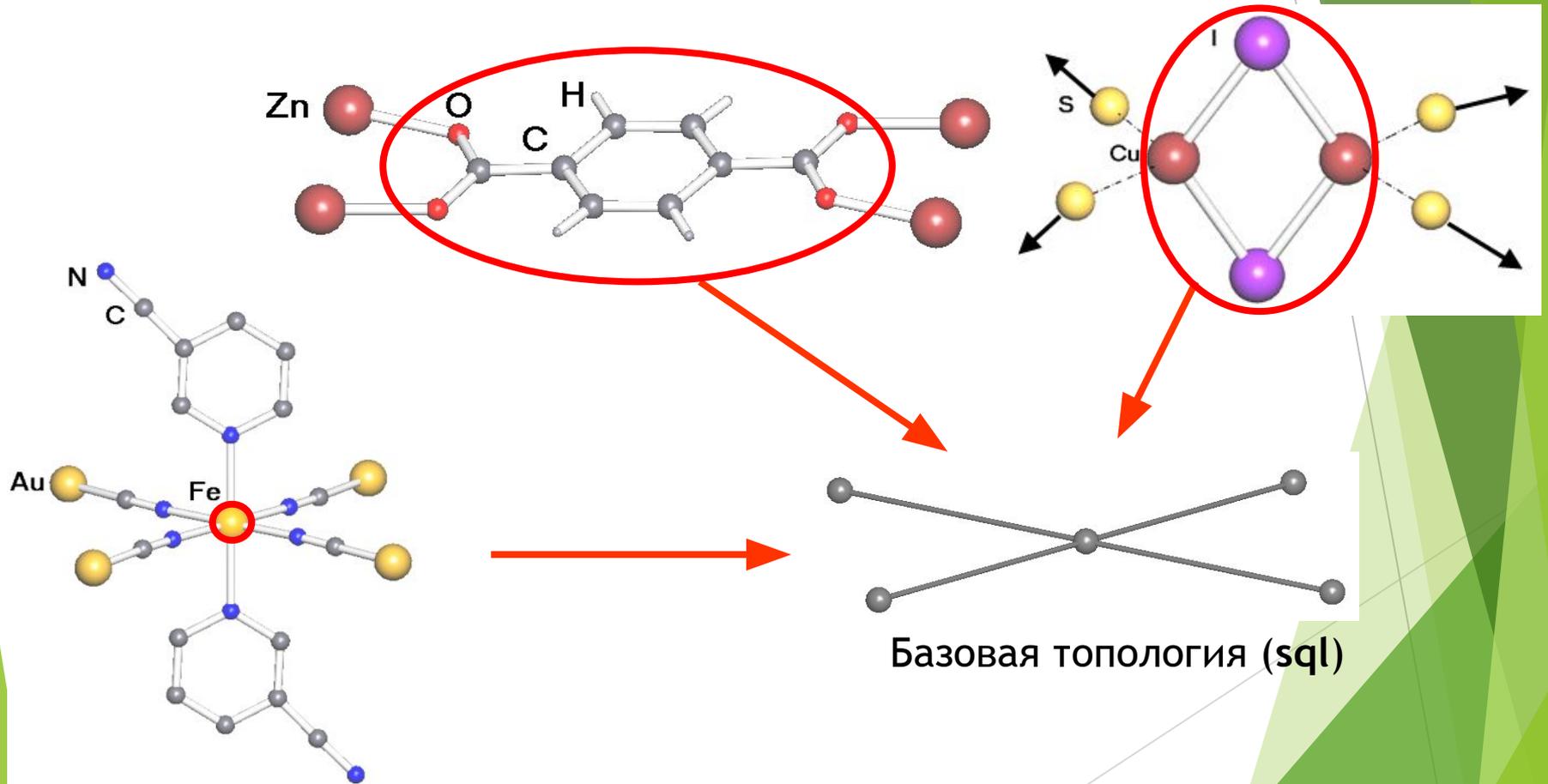
Полное представление

MOF-5



Кластерное представление
примитивная кубическая топология

Способы упрощения ТОПОЛОГИИ



Обозначения ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ТИПОВ

Символы RCSR

<http://rcsr.anu.edu.au/>

dia

Алмазная сетка

Производные сетки

dia-a =

аугментированная

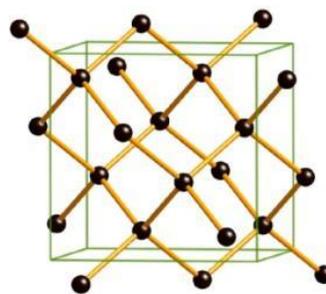
dia-b = бинарная

dia-c = катенированная

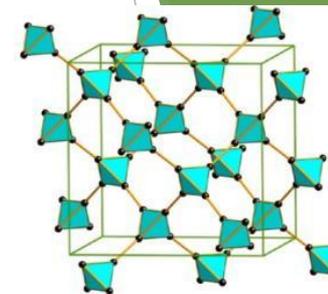
dia-d = дуальная

dia-e = реберная

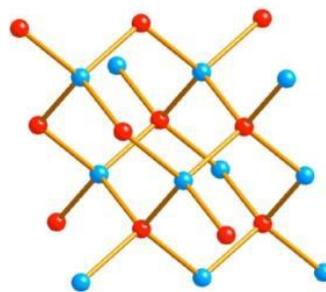
dia-x = расширенная



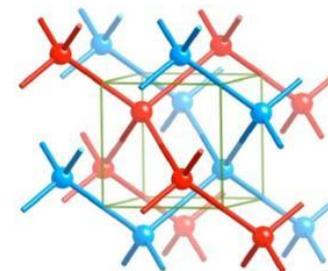
dia



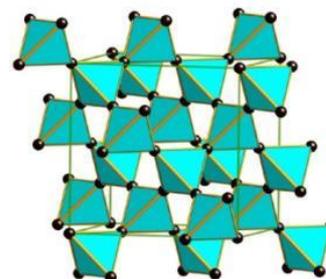
dia-a



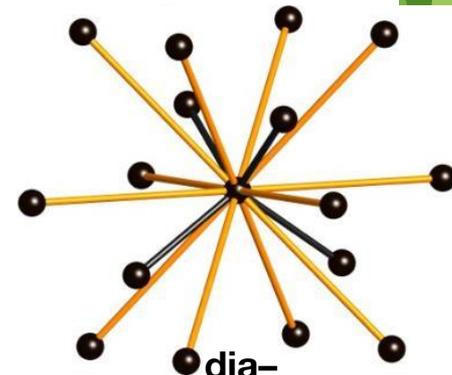
dia-b



dia-c



dia-e



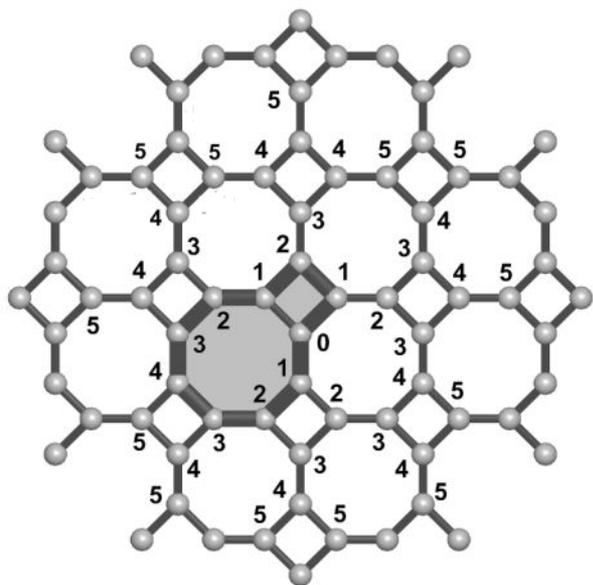
dia-x

Определение топологического типа

Топологический тип - совокупность кристаллических структур с одной топологией атомной сетки

Изоретикулярный ряд - совокупность кристаллических структур с одной топологией базовой (упрощенной) сетки

Определение топологического типа



CS: 3 5 8 11 13
ES: 4.8.8
PS: 4.8²
VS: 4.8.8

fes

1. Точечный символ (PS)
2. Координационная последовательность (CS)
3. Расширенный точечный символ (ES)
4. Вершинный символ (VS)

TTD коллекция ~200,000 топологий
<https://topospro.com>

Топологический тип

Топологические базы данных

<https://topcryst.com>

topcryst The Samara Topological Data Center Sign In New Search

Database Services FAQ

Topology name: **dia-a; 4/3/c6**

Example net
Valence-bonded MOFs, standard representation. Refcode: MUMXB01

Occurrence 62

Complete 5 random of 11

Database Code	Database	Z	Property	Number of Units
85527	ICSD	2	-	1
16222	ICSD	2	-	1
92587	ICSD	2	-	1
2404	ICSD	2	-	1
92586	ICSD	2	-	1

Valence-bonded MOFs, standard representation 5 random of 22

Database Code	Database	Z	Property	Number of Units
LERRIM	CSD	1	-	1
MUMWOG	CSD	1	-	1
MUMWUM	CSD	1	-	1
KETSEK	CSD	1	-	1
ZAJSEI	CSD	1	-	1

Valence-bonded MOFs, cluster representation 5 random of 11

Database Code	Database	Z	Property	Number of Units
MUMYUO	CSD	2	-	1
MUMYAU	CSD	2	-	1
MUNDAA	CSD	2	-	1
MUMYEY	CSD	2	-	1

Search Results - Access

cdc.cam.ac.uk/structures/Search?Ccdid=MUMYUO

CSD Entry: MUMYUO Sign In

Your query was: CCDC identifier(s): MUMYUO and the search returned 1 record. New Search

Results

Database Identifier	Deposition Number
MUMYUO	197117

Download

MUMYUO : catena-(Triethyleneimine octakis[μ₂-sulfido]-di-germanium-di-indium hydrate)
Space Group: I 4₁/a c d (142), Cell: a 22.737(2)Å b 22.737(2)Å c 41.591(6)Å, α 90° β 90° γ 90°

3D viewer

Chemical diagram

Additional details

Deposition Number 197117

Data Citation Nanfeng Zheng, Xianhui Bu, Bing Wang, Pingyun Feng CCDC 197117: Experimental Crystal Structure Determination, 2014, DOI: 10.5517/cc6m3mj

Synonyms UCR-22InGeS-TETA

Deposited on 06/11/2002

Associated publications

Стандартный топологический анализ



Топологическая классификация

Изоретикулярные ряды (одна топология базовой сетки)



Топологические типы (одна топология структуры)

1

2

3



Структурные типы (схожая геометрия структур)

1

2

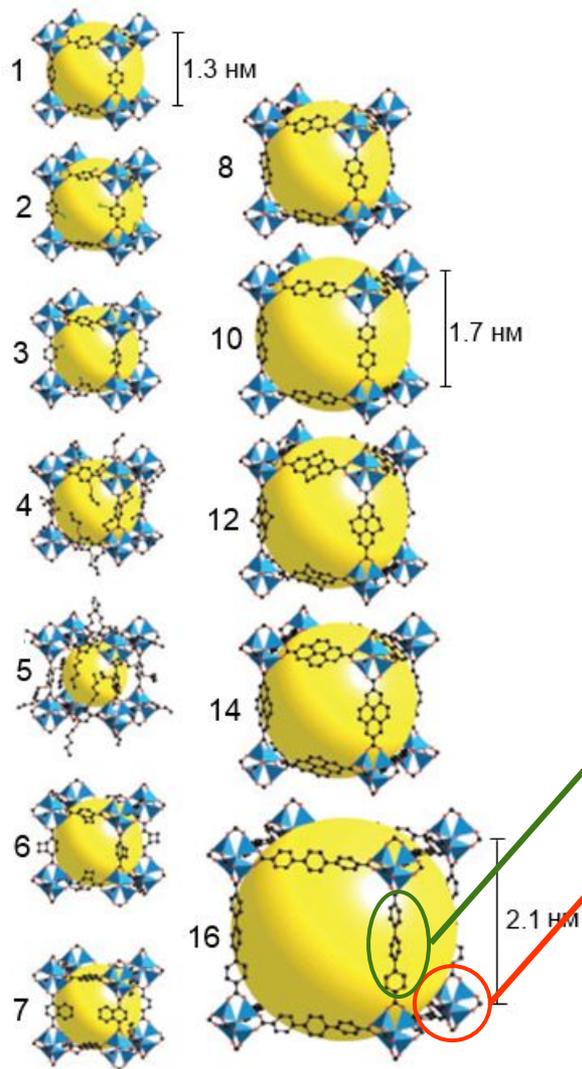
3

4

5

6

Дизайн и ретикулярная ХИМИЯ



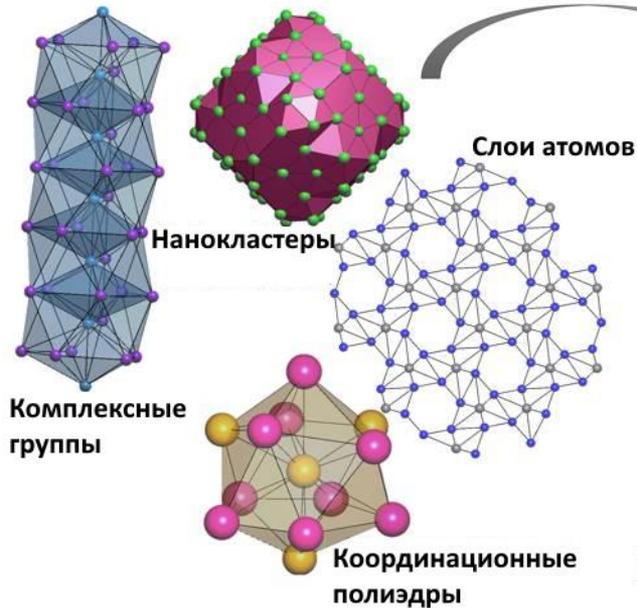
Металл-органические каркасы

(адсорбенты, катализаторы, газовые контейнеры)

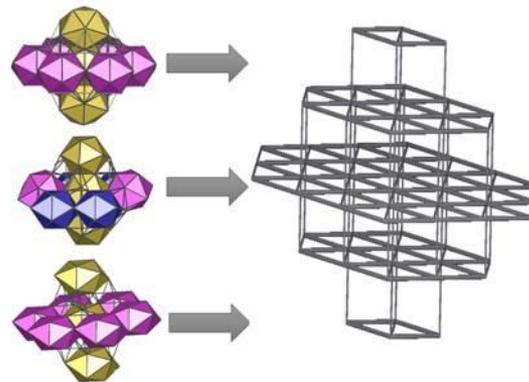


Комбинированные методы дизайна

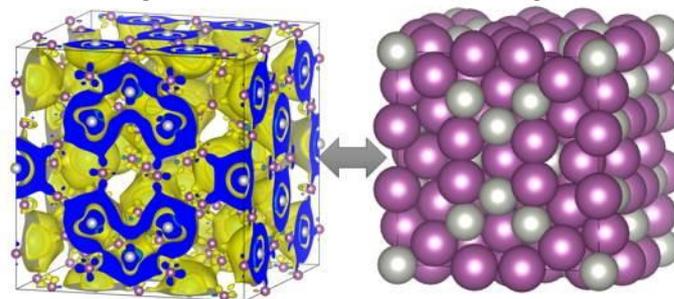
Строительные единицы



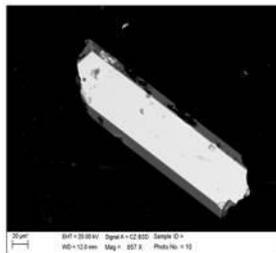
Способы сборки структуры (топологический дизайн)



Прогнозирование структуры (квантовая механика)



Синтез



Спасибо за внимание