

## ДИЗАЙН И СИНТЕЗ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ

Александров Е. В.<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> *Международный научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению (МНИЦТМ), Самарский государственный технический университет, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244, e-mail: alexandrov\_ev1@mail.ru*  
<sup>б</sup> *МНИЦТМ, Самарский университет, 443011, Самара, ул. Ак. Павлова, д. 1*

Дизайн координационных сеток опирается на геометрико-топологические правила сборки строительных блоков в периодические структуры и переплетающиеся мотивы. Наиболее мощным инструментом для поиска таких взаимосвязей является программный комплекс ToposPro (<https://topospro.com/>) в совокупности с топологическими базами данных (<https://topocryst.com/>).<sup>1,2</sup> Выявленные правила составляют базу знаний для прогнозирования строения и свойств новых микропористых каркасов. Так осуществлен синтез микропористых цирконий-органических каркасов для энергоэффективного разделения СБН14 углеводов.<sup>3</sup>

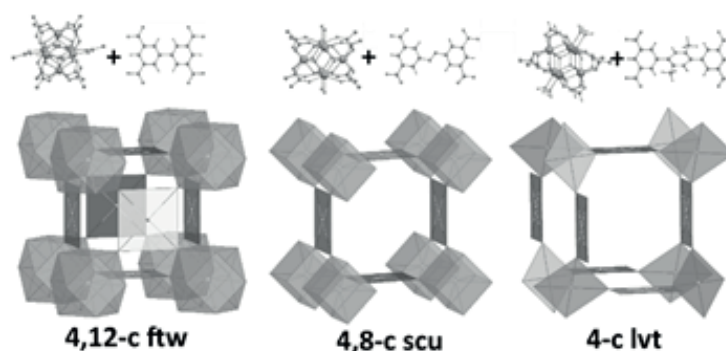


Рисунок 1. Строительные блоки и базовые сетки для цирконий-органических каркасов.

## Литература

1. Blatov V.A., Alexandrov E.V., Shevchenko A.P. Topology: ToposPro in Comprehensive Coordination Chemistry III, 2019, Elsevier. Принята к печати, doi: 10.1016/B978-0-12-409547-2.14576-7.
2. Alexandrov E.V., Shevchenko A.P., Blatov V.A. Topological databases: why do we need them for design of coordination polymers? Cryst. Growth Des., 2019, Принята к печати, doi: 10.1021/acs.cgd.8b01721.
3. Wang H., Dong X., Lin J., Teat S.J., Jensen S., Cure J., Alexandrov E.V., Xia Q., Tan K., Wang Q., Olson D.H., Proserpio D.M., Chabal Y.J., Thonhauser T., Sun J., Han Y., Li J. Nature Comm., 2018, 9, 1745.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проекты 18-73-10116 и 16-13-10158), Правительства Российской Федерации (проекты 1.6101.2017/9.10 и МК-415.2019.3) и Российского фонда фундаментальных исследований (проект 17-57-10001).*