

**UNIVERSITATEA „BABEȘ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE CHIMIE ȘI INGINERIE CHIMICĂ
FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ**

Rezumatul tezei de doctorat

Design-ul nanostructurilor moleculare/cristaline

**Prof. Dr. Mircea V. Diudea
Prof. Dr. Bazil Pârv**

**Drd. Virginia-Ramona Hatfaludi
(căs. Bucilă)**

**Cluj-Napoca
2013**



UNIUNEA EUROPEANĂ



GVERNUL ROMÂNIEI
MINISTERUL MUNCII, FAMILIEI
PROTECŢIEI SOCIALE ŞI
PERSOANELOR VÂRSTNICE
AMPOSDRU



Fondul Social European
POSDRU 2007-2013



Instrumente Structurale
2007-2013



MINISTERUL
EDUCAŢIEI
NAŢIONALE

OIPOSDRU



UNIVERSITATEA BABEŞ-BOLYAI
CLUJ-NAPOCA

MULŢUMIRI

Această lucrare a fost posibilă prin sprijinul financiar oferit prin Programul Operațional Sectorial Dezvoltarea Resurselor Umane 2007-2013, cofinanțat prin Fondul Social European, în cadrul proiectului POSDRU/107/1.5/S/76841, cu titlul „Studii doctorale moderne: internaționalizare și interdisciplinaritate”.

FONDUL SOCIAL EUROPEAN

Investește în
OAMENI

Parteneri:



UNIVERSITATEA
„ALEXANDRU IOAN CUZA”
din IAȘI



universität
wien



Universität
Regensburg

CUPRINS

Introducere.....	4
Studiu de literatură.....	7
Cap. I Noțiuni de Teoria Grafurilor.....	7
Operatii pe mape.....	14
Operații simple pe mape.....	14
Operații complexe pe Mape.....	17
Operații generalizate pe Mape.....	24
Cap. II. Noțiuni de Cristalografie.....	27
Sistemul cristalografic.....	27
Clasificarea topologică a rețelelor.....	31
Programul TOPOS.....	40
Sursele colecției TTD.....	40
Programul Systre.....	42
Contribuții personale.....	43
Cap. III Rețele 3-periodice.....	43
3,4-c.....	43
3-c.....	52
4-c.....	70
Altele.....	79
Vizualizarea cu ajutorul programului 3dt a topologiilor analizate.....	114
Cap. IV Rețele 1-periodice.....	117
Detalii de calcul.....	117
Proiectarea structurilor.....	118
Cap. V Polinomul Omega în structuri cristaline.....	127
Polinomul Omega.....	127
Rețele de cristale proiectate prin leapfrog și chamfering.....	129
Lattice construite prin $Op(Trs(P4(Oct)))$	133
Rețele bazate pe grafuri Dyck.....	135
Rețele de unități Dyck Z-56.....	136
Rețele de unități Dyck A-56.....	139
Polinomul Omega în laticia Dyck A-(56&104).....	140
Polinomul Omega în laticia Dyck A-(104&56).....	141
Rețele acoperite cu motive tripentylene și triphenylene.....	142
Rețele acoperite cu unități de Sumanene.....	144
Polinomul Omega în rețele bazate pe Sumanene.....	145
Rețele cu motive hexagonale și heptagonale.....	148
Concluzii.....	149
Cap. VI Programe software originale.....	150
Programul atom.exe.....	152
Programul ahin.exe.....	179
Programul hinZalign.exe.....	182
Concluzii generale.....	189
Bibliografie:.....	190
Listă de publicații:.....	199
Comunicări științifice:.....	199

Cuvinte cheie: nanostructuri, operații pe mape, acoperire, program de calculator, software, graf, polinom, rețele, polinomul Omega

Introducere

În cadrul tezei de doctorat sunt prezentate principalele aspecte teoretice și contribuțiile personale referitoare la clasificarea și analiza complexă, din punct de vedere cristalografic, a unor structuri nano-cristaline date, construite cu ajutorul operațiilor pe mape.

Din 69 de structuri nano-cristaline 3-periodice studiate, 39 rezultând a fi topologii noi (4 structuri de rețea noi 3,4-c, 10 structuri de rețea noi 3-c, 1 structura de rețea nouă 4-c și încă 24 de alte rețele noi) și din structurile 1-periodic studiate, toate rezultând a fi topologii noi.

Pentru a analiza aceste structuri, s-a folosit programul TOPOS- cu ajutorul căruia s-au putut descrie cristalografic, subliniind pentru fiecare categorie de rețea 3-c, 4-c, 3,4-c, sau altele, parametrii topos, simbolul punct, stochiometria, simbolul de vârf, folosind AutoCN (program de calcul și editare a matricei de adiacență), IsoCryst (program de vizualizare a structurilor de cristal geometrice și analiză topologică) și programul ADS.

De asemenea, s-a mai folosit un program separat numit Systre, ce folosește o metodă numită “plasare baricentrică” pentru a determina simetria ideală a rețelei cristaline (optimal embedding) și pentru a analiza structura topologică. Pentru vizualizarea noilor topologii am folosit apoi programul 3dt, program realizat tot de către cei de la Gavrog project, ca și Systre, program ce permite acoperirea fețelor structurii și astfel putând vizualiza structurile în format 3D.

Pentru a transfera structurile nano-cristaline studiate, în programul TOPOS, a fost necesară crearea de două programe.

Noile topologii descoperite în acest mod, au fost deja introduse în colecția de baze de date a acestui program și sunt deja puse la dispoziția utilizatorilor.

O topologie nouă descoperită este introdusă în colecții de baze de date ale diferitelor programe computaționale folosite de chimiști și este de un real ajutor chimiștilor din domeniul rețelelelor metal-organice, care au interes în descoperirea de noi rețele și celor cu interes în noi forme de carbon .

Menționez că în cadrul rezumatului sunt menținute atât numerotarea capitolelor cât și trimerile bibliografice așa după cum sunt prezentate în teză.

Contribuții personale

Cap.III Rețele 3-periodice

Contribuțiile personale se referă la clasificarea structurilor cuprinse în acest capitol și la descrierea cristalografică a lor. O parte din rezultatele obținute sunt cuprinse în articolul acceptat spre publicare: Virginia Bucilă, Monica Ștefu and Beata Szeffler Octahedral CNT Junctions as P-Type Networks, *Studia Univ. Babes-Bolyai Chemia*, 2013.

În acest capitol sunt prezentate rezultatele obținute în urma examinării celor 69 structuri nano-cristaline 3-periodice studiate cu ajutorul programelor create și cu ajutorul programului TOPOS.⁷²

Cele 69 de structuri sunt împărțite pe categorii: 3,4-c (conectivitate 3 și 4) cu 8 structuri din care 4 topologii noi, 3-c (conectivitate 3) cu 19 structuri din care 10 topologii noi, 4-c (conectivitate 4) cu 9 structuri din care 1 topologie nouă și alte 33 structuri (conectivitate mixta) din care 24 sunt topologii noi.

Pentru fiecare structură în parte am definit parametrii TOPOS, simbolul de punct, Point symbol for net, stoichiometria, tipul topologic și simbolul vârf, Vertex Symbol, VS.

Figura din stânga reprezintă imaginea realizată cu ajutorul programului TOPOS și este reprezentată și celula unitate, iar figura din dreapta reprezintă structura din fișierul original .hin studiat cu ajutorul programelor realizate și nu numai.

La patru dintre structuri am prezentat și vizualizarea cu programul 3dt.

În cadrul acestui rezumat este prezentat câte un exemplu (fără parametrii Topos) pentru fiecare categorie în parte: 3,4-c, 3-c, 4-c și altele.

3,4-c

6. NEW: diu2 (Cube, Polygonal P4, Unit, co-net, hexagon 6, X cut edges)

CP4UCo6X

Point symbol for net: $\{6^3\}4\{6^4.8^2\}3\{6^5.8\}6$

3,4,4-c net with stoichiometry (3-c)4(4-c)9; 3-nodal net

VS [6.6.6] [6.6.6.6.6.8₂] [6₂.6₂.6₂.6₂.8.8]

New topology

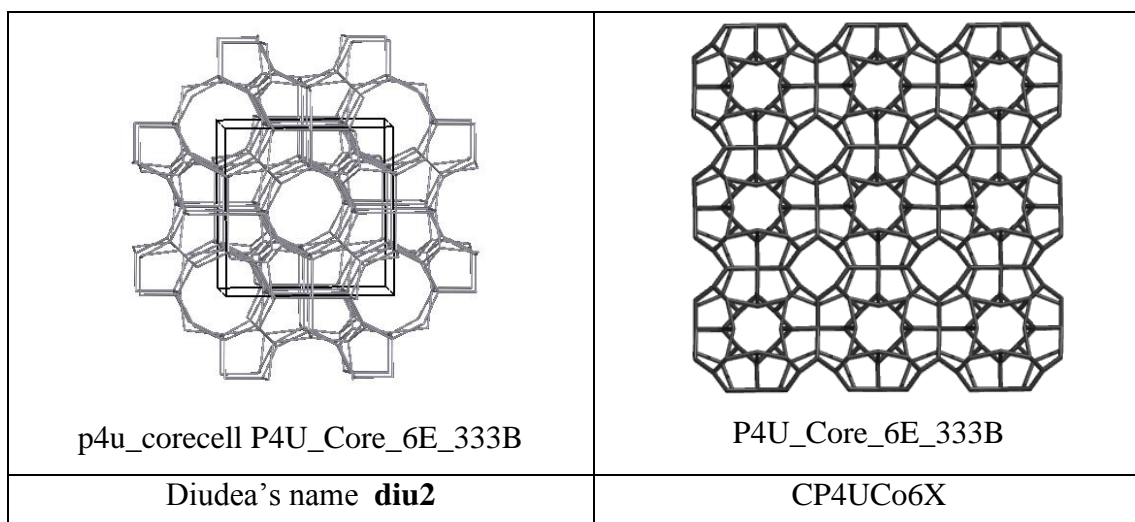


Fig.3. 1 NEW: diu2 (Cube, Polygonal P4, Unit, co-net, hexagon 6, X cut edges) CP4UCo6X

3-c

5. NEW diu8=CQOp2a

Point symbol for net: (8^3)

3,3-c net with stoichiometry (3-c)4; 2-nodal net

VS [8.8.8₂] [8.8.8]

New topology

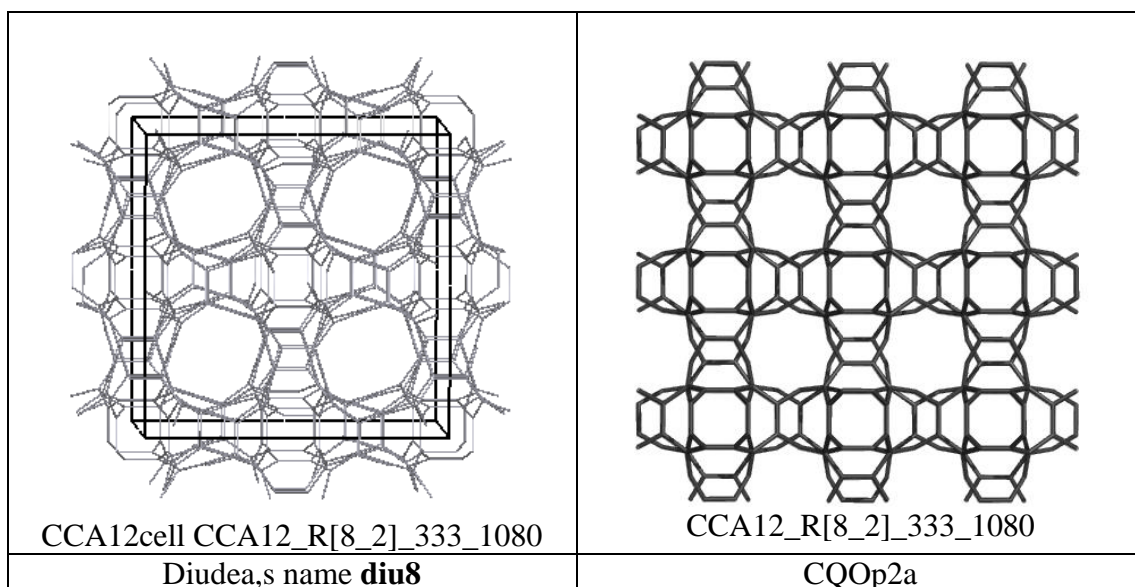


Fig.3. 2 NEW diu8=CQOp2a

4-c

6. mgz-x-d L5

Point symbol for net: $(5^5.6)12(5^6)5$

4,4,4,4,4,4-c net with stoichiometry (4-c)34; 7-nodal net

Topological type: mgz-x-d

VS $[5.5.5.5.5.5]$ $[5.5.5.5.5.5]$ $[5.5.5.5.5.6]$ $[5.5.5.5.5.6]$ $[5.5.5.5.5.6]$ $[5.5.5.5.5.5]$
 $[5.5.5.5.5.6]$

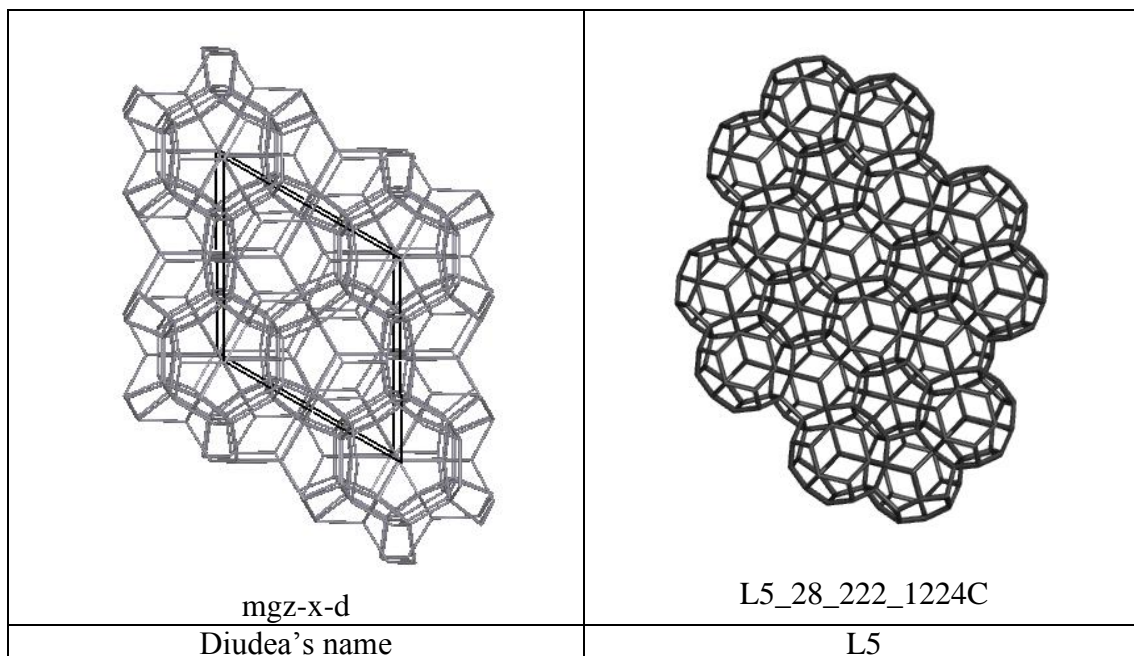


Fig.3. 3 mgz-x-d L5

altele

33. NEW CP4R_444_5248

Point symbol for net: $\{4.5^{10}.6.7^2.8\}3\{4.5^5\}6\{5^3\}4\{5^5.8\}6$

3,3,4,4,4,6-c net with stoichiometry (3-c)4(4-c)12(6-c)3; 6-nodal net

VS $[5.5.5.5.5.2.8_2]$ $[5.5.5.5.5.8_2]$ $[4.5.5.5.5.5.5.5.5.5.8.8_2.*.*]$

New topology

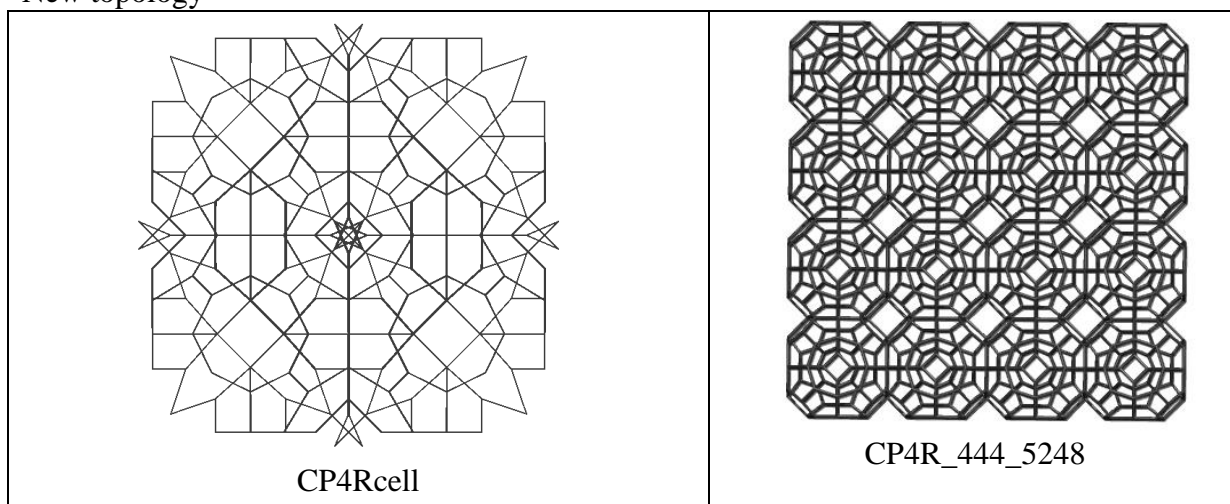


Fig.3. 4 NEW CP4R_444_5248

Vizualizarea cu ajutorul programului 3dt a topologiilor analizate

Programul 3dt, program oferit de The Gavrog project, oferă o vizualizare calitativ mai bună și mai detaliată a imaginii și ca urmare am considerat utilă vizualizare structurilor studiate în format 3D.

La fiecare exemplu am atașat imaginea realizată cu Jmol⁸⁸, Topos⁷² și 3dt⁸⁹.

În acest rezumat sunt prezentate două exemple:

Exemplul 1. CQOp2a, Point symbol for net: (83), 3-c net with stoichiometry (3-c)4; 2-nodal net; VS [8.8.82] [8.8.8]; Known also as “etk” or 83P; diu8

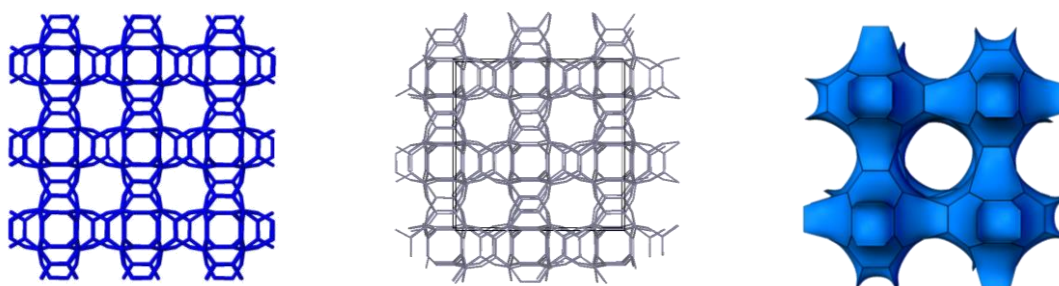


Fig.3. 5

Exemplul 2. CP4UCo6X, Point symbol for net: (63)4(64.82)3(65.8)6, 3,4-c net with stoichiometry (3-c)4(4-c)9; 3-nodal net; VS [6.6.6] [6.6.6.6.62.82] [62.62.62.62.8.8]; New topology; diu2

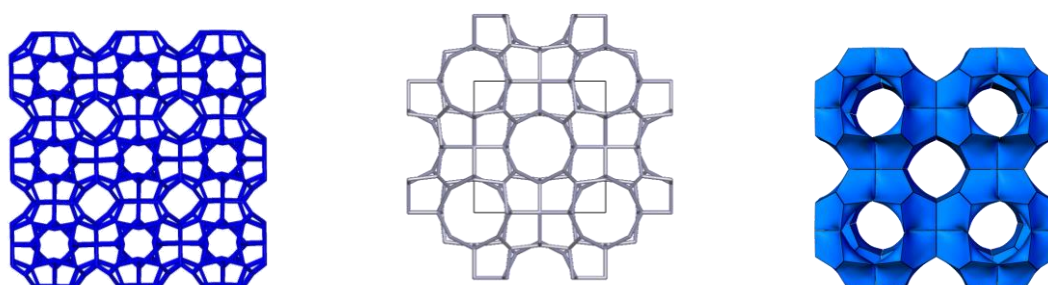


Fig.3. 6

Cap. IV Rețele 1-periodice

Detalii de calcul

Contribuțiile personale se referă la clasificarea și descrierea cristalografică a structurilor cuprinse în acest capitol. Rezultatele obținute au fost publicate în lucrarea: M.V. Diudea, V.R. Bucilă, D.M. Proserpio, 1-Periodic Nanostructures, *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 2013, 70(2), p.545-564.

Cu ajutorul programului Topos (pachet program pentru analiza multifuncțională cristalochimică, am clasificat structurile 1-periodice, atribuindu-le un grup spațiu compatibil cu structura și calculând simbolul punct, the Point Symbol. Toate structurile sunt noi și n-au mai fost niciodată descrise în baza de date TOPOS.

Am folosit trei programe: atom.exe, hinzalign.exe și hin2topos.exe pentru a transfera structurile studiate în Topos.

Programul atom.exe ne-a permis să găsim direcția/orientarea structurii. Cei trei parametri de intrare sunt: a_0 , δ , α , unde a_0 este un atom al structurii care e originea noilor coordonate în timp ce δ (metric) și α (unghiular) sunt parametri de toleranță.

Pentru un atom a , fie E_a mulțimea muchiilor adiacente cu a . Pentru doi atomi, a, a' definim “similaritatea de vârf” ca și cardinalitatea mulțimii $E_a \cap E_{a'} = \{e_a \mid e_a \in E_a, \exists e_{a'} \in E_{a'}, \mid e_a - e_{a'} \mid \leq \delta; \angle(e_a, e_{a'}) \leq \alpha\}$.

Programul colectează o mulțime $S(a_0)$ de atomi de maximă similaritate cu a_0 . Atomii din $S(a_0)$ sunt candidați pentru a fi împerechiați cu a_0 pentru a forma vectorul repetitiv. Vectorul este ales în funcție de anumite criterii, cum ar fi “cel mai scurt”, “cel mai lung” etc.

Dându-se un vector v , programul hinzalign.exe prima dată rotește sistemul de coordonate astfel încât axa z devine paralelă cu v . Coordonatele fiecărui atom sunt recalulate în funcție de noul sistem de coordonate. În continuare, sistemul de coordonate este translatat cu originile în atomul a_0 (adică, în noul sistem de coordonate translatat, a_0 va deveni (0,0,0)).

Fișierul rezultat .hin a fost convertit într-un fișier Topos, folosind cel de-al treilea program, numit hin2topos.exe.

Imaginile obținute cu programul Topos trebuie să fie similare cu structura originală pentru ca ele să fie interpretate corect.

Pentru fiecare structură, coordonatele nodurilor (3-c, 4-c etc.), numărul de noduri independente topologic (n -nodal), și simbolul punct (PS) este dat.⁸⁵

Proiectarea structurilor

Structurile ipotetice descrise aici, au fost proiectate folosind programele CVNET²³ și NANO STUDIO⁹⁰. Unitățile folosite în construirea de structuri mai complexe sunt prezentate în Fig.4.1. Cinci astfel de unități, notate cu U_1 , formează un inel hiper-pentagonal R_5 . Un dodecaedru având în locul fețelor sale pentagonale hiper-fețe, hiper-pentagonale R_5 , este o structură spongioasă, numită în continuare U_{20} , pentru a reaminti cele 20 cuști/unități simple care o compun.. În continuare, prin identificarea hiper fețelor a două unități U_{20} se obțin structuri 1-periodice. Sunt date experimentale care arată că în aliaje ca AlMn, AlFe, AlCuCo și AlCoNi, cu un șablon de difracție de simetrie rotațională de zece ori, au și o periodicitate translațională 1-dimensională de-a lungul axei rotațională de zece ori. Această simetrie este de asemenea numită simetrie “axială”. Structura de tip tijă discutată aici a fost caracterizată în termeni cristalografici folosind software-ul Topos.⁷²

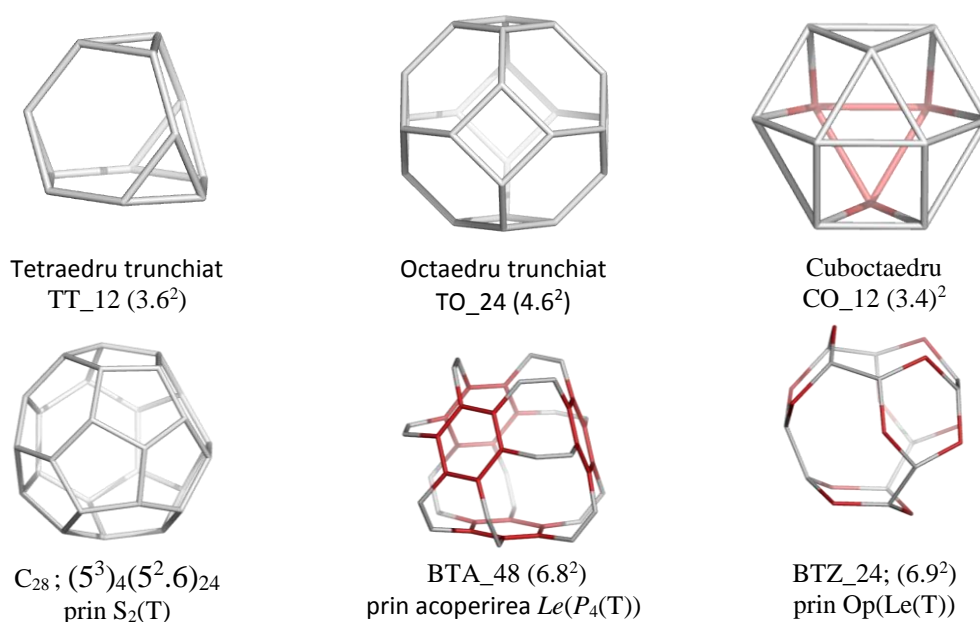


Fig.4. 1 Unități U_1 folosite în construirea de structuri complexe

În acest capitol, unsprezece rețele 1-periodice noi sunt expuse, împreună cu descrierea lor cristalografică și cu operația pe mapă utilizată în proiectarea lor.

În acest rezumat sunt prezentate două exemple.

Structurile U_{20} din Fig. 4.2 și 4.3 sunt construite din BTA_48 și BTZ_24 (Fig.4.1, rândul de jos), structure numite polibenzene.⁹²⁻⁹⁴ Unitatea BTZU_{20_480} a fost arătată că se autoaranjează într-o matrice sferică mai complexă.

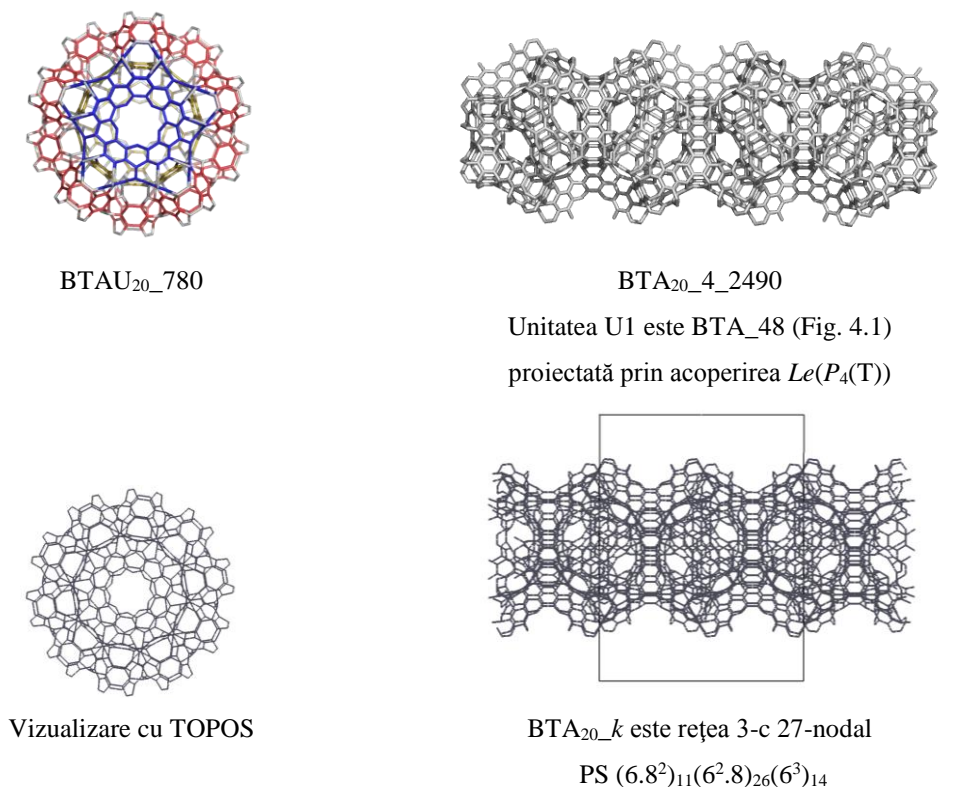
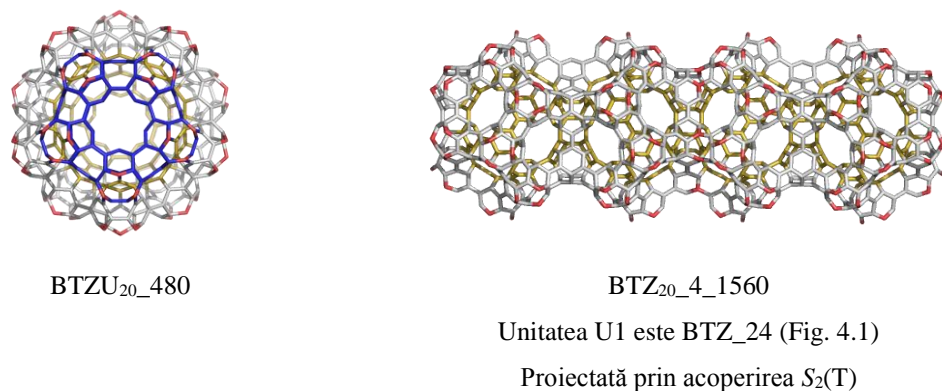
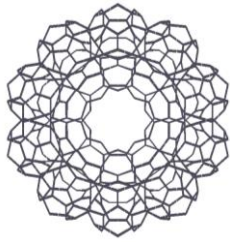
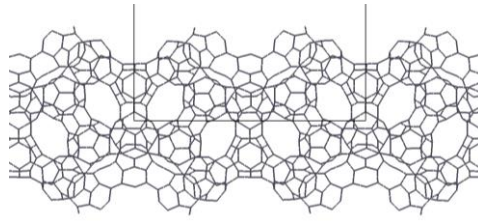


Fig.4. 2 BTA_{20_k} structură ca o tijă





Vizualizare cu TOPOS



BTZ_{20_k} este rețea 3-c net 20-nodal

PS (5.6.8)₂(5.8²)₃(6.8²)₆

Fig.4. 3 BTZ_{20_k} structură ca o tijă

Cap. V Polinomul Omega în structuri cristaline

Polinomul Omega $\Omega(x)$ ¹⁰⁶⁻¹⁰⁸ este definit pe baza panglicilor de muchii opuse s_1, s_2, \dots, s_k în graf. Notând prin m , numărul de *ops* de cardinalitate/lungime $s=|S|$, atunci se poate scrie

$$\Omega(x) = \sum_s m \cdot x^s$$

Prima derivată (în $x=1$) poate fi luată ca un graf invariant sau ca un index topologic:

$$\Omega'(1) = \sum_s m \cdot s = |E(G)|$$

Un index, numit Cluj-Ilmenau $CI(G)$, a fost definit pe $\Omega(x)$:

$$CI(G) = \{ [\Omega'(1)]^2 - [\Omega'(1) + \Omega''(1)] \}$$

În grafuri arbore, polinomul Omega numără doar muchiile neopuse, fiind inclus în termenul cu exponentul $s=1$.

Pe baza fâșiilor/panglicilor s , polinomul Sadhana¹⁰⁹ și indexul corespunzător¹¹⁰ pot fi de asemenea definite:

$$Sd(x) = \sum_s m \cdot x^{e-s}$$

$$Sd'(G,1) = \sum_s m \cdot (e-s) = Sd(G)$$

Polinomul Omega descrie acoperirile nanostructurilor poliedrale sau rețelele de structuri cristaline, ca o descriere complementară a celei cristalografice.

În continuare sunt prezentate doar secțiunile: Rețele de cristale proiectate prin leapfrog și chamfering, Lattice construite prin $Op(Trs(P4(Oct)))$, Rețele bazate pe grafuri Dyck și concluzii.

Rețele de cristale proiectate prin leapfrog și chamfering

În această secțiune se prezintă patru rețele infinit periodice, a căror unități repetitive pot fi proiectate prin aplicarea de operații pe mape leapfrog Le și chamfering Q pe cubul C .^{27,45} Unitățile sunt cuști mici C_{24} and C_{32} , cu simbolul de vârf, vertex symbol (4.6^2) și respectiv $(4.6^2)(6^3)$.

Latticea CLe_4 , din Fig. 5.1, este o rețea triplu periodică construită din C_{24} = CLe_{24} , prin identificarea de fețe (4,4). Este binecunoscuta sodalite, rețeaua *sod*, o rețea uninodală 4-c, aparținând la grupul $Im-3m$ și având simbolul de rețea $(4^2.6^4)$ și

tipul topologic sod/SOD; $4/4/c1$; sqc970. A se nota că unitatea repetitivă CLe_24 este doar un octaedron trunchiat.

Aplicând operația Chamfering Q pe cub, rezultă în repetarea unității CQ_32. În continuare, prin identificarea fețelor (4,4), (4,6) sau (6,6) rezultă în diferite rețele: CQ₄, CQ_{4,6} sau CQ₆ chiar și obiectul de început este unul și același. Fig. 5.2, arată rețeaua CQ₄ (cunoscută ca tfg sau sqc9223), o latice 2-nodală triplu periodică a grupului $Pm-3m$ (<http://epinet.anu.edu.au>); simbolul de punct, point symbol este $(4.6^4.8)3(6^3)2$, rețea 3,4-c cu stochiometria $(3-c)2(4-c)3$.

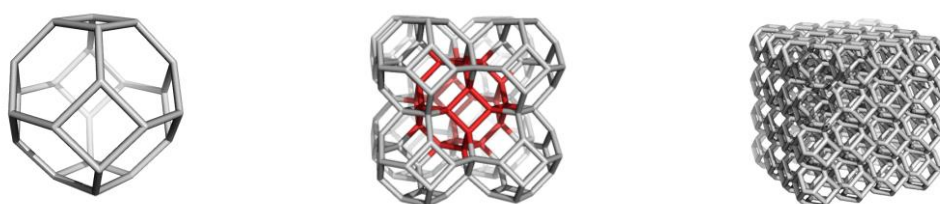


Fig.5. 1 CLe₄=sod, o latice triplu periodică aparținând grupului $Im-3m$, proiectat prin Le(C) și identificând fețe (4,4): unitatea CLe_24; (simbolul de vârf, vertex symbol 4.6^2) (stânga) și două domenii cubice ale rețelei, 2,2,2_144 (mijloc) și 4,4,4_960 (dreapta); ultimul numără atomii dintr-un domeniu dat

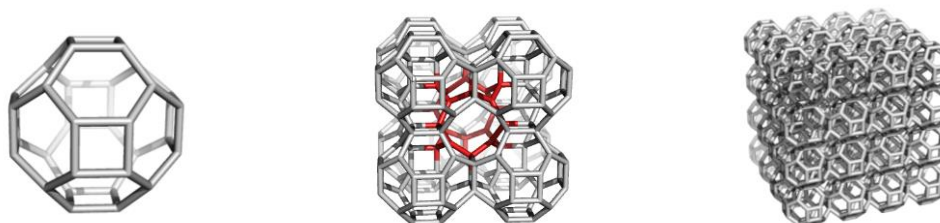


Fig.5. 2 CQ₄=tfg, sqc9223, grupul $Pm-3m$, o latice triplu periodică proiectată prin Q(C) și identificând fețe (4,4): unitatea CQ_32, simbol de vârf, vertex symbol $(4.6^2)(6^3)$ (stânga) și două domenii cubice, 2,2,2_208 (mijloc) și 4,4,4_1472 (dreapta)

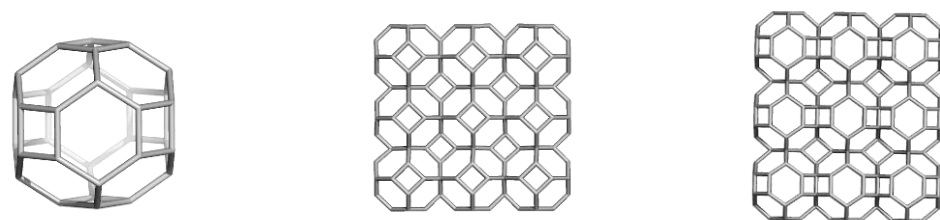


Fig.5. 3 CQ_{4,6}=sqc8121, grupul $P4/mmm$, o rețea triplu periodică proiectată prin Q(C(a,b,c) și identificând fețe (4,6): unitatea CQ_32 (stânga) și două domenii cubice, 3,3,3_576 (a) (mijloc) și 3,3,3_576 (b,c) (dreapta)

Rețeaua CQ_{4,6} este rețea 3-nodală 4,4,4-c a grupului $P4/mmm$, cu stochiometria $(4-c)2(4-c)(4-c)$ și simbolul punct pentru rețea $(4.6^5)(4^2.6^4)(4^3.6^3)2$. Specificarea ei topologică este sqc8121 (epinet.anu.edu.au).

În final, rețeaua CQ_6 (Fig. 5.3) este de asemenea cunoscută ca rețeaua *ast*, grupul $Fm-3m$; este o rețea triplu periodică 4,4-c, 2-nodală, construită prin identificarea fețelor (6,6) a unității C_{32} . Simbolul de punct pentru rețea, the point symbol este $(4^3.6^3)4(6^6)$ și stochiometria $(4-c)4(4-c)$; tipul ei topologic este: *ast*/octadecasil/AST; sqc3869.

Formule analitice pentru a calcula polinomul Omega au fost dezvoltate fie pentru domenii cubice incomplete (a,b,c) , $a \geq b \geq c$ sau complete (a,a,a) ; alți parametri de rețea ca numărul de vârfuri, muchii și inele sunt date, în funcție de a (sau k) care este numărul de unități repetitive în o direcție într-un domeniu cubic.

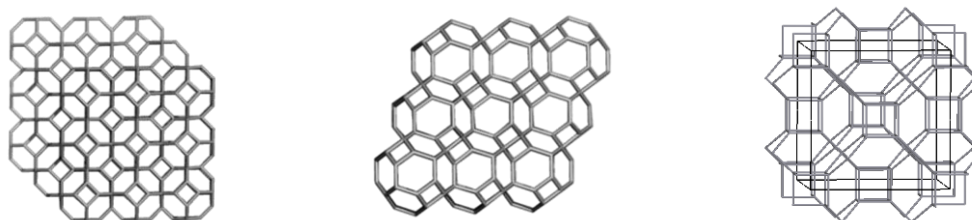


Fig.5. 4 Rețeaua CQ_6 =ast, grup $Fm-3m$, o rețea triplu periodică proiectată prin $Q(C)$ și identificând fețe f6: domeiul DP_333_492 (stânga); domeniul TP_333_484 (mijloc) și celula unitate (dreapta)¹¹¹

Rețea	Formule
$G=CLE_4(a,b,c); a \geq b \geq c :$	$\Omega(G, X) = 4 \sum_{i=1}^{c-1} X^{4ai+2i} + 2(b-c+1)X^{(4a+2)c} +$ $4 \sum_{i=1}^{c-1} X^{4bi+2i} + 2(a-c+1)X^{(4b+2)c} +$ $4 \sum_{i=1}^{b-1} X^{4ci+2i} + 2(a-b+1)X^{(4c+2)b}$
$G= CLe_4(a,a,a):$	$\Omega(G, X) = 12 \sum_{i=1}^{a-1} X^{2i(2a+1)} + 6X^{2a(2a+1)}$ $\Omega'(G,1) = 12a^2(2a+1)$
$G=CQ_4(a,b,c); a \geq b \geq c :$	$\Omega(G, X) = 4abcX^6 + aX^{4bc+2b+2c} + bX^{4ac+2a+2c} + cX^{4ab+2a+2b}$
$G= CQ_4(a,a,a):$	$\Omega(G, X) = 4a^3X^6 + 3aX^{4a(a+1)}$ $\Omega'(G,1) = 12a^2(3a+1) = e(G) = E(G) $ $v(G) = V(CQ_4) = 4a^2(3+5a)$ $R_4 = 3a^2(1+3a); R_6 = 12a^3$
$G=CQ_{4,6}(a,b,c); a \geq b \geq c :$	

$$\begin{aligned}\Omega(G, X) &= 4 \sum_{i=1}^{b-1} X^{2(3c+1)i} + 2(a-b+1)X^{2(3c+1)b} + \\ & 4 \sum_{i=1}^{c-1} X^{2(2a+1)i} + 2(b-c+1)X^{2(2a+1)c} + \\ & 4 \sum_{i=1}^{c-1} X^{2(2b+1)i} + 2(a-c+1)X^{2(2b+1)c} + cX^{4ab+2a+2b}\end{aligned}$$

$G=CQ_{4,6}(a,a,a)$:

$$\Omega(G, X) = 4 \sum_{i=1}^{a-1} X^{2i(3a+1)} + 8 \sum_{i=1}^{a-1} X^{2i(2a+1)} + 2X^{2a(3a+1)} + 4X^{2a(2a+1)} + aX^{4a(a+1)}$$

$$\Omega'(G, 1) = 16a^2(2a+1) = e(G) = |E(G)|$$

$$v(G) = |V(CQ_{4,6})| = 16a^2(1+a)$$

$$R_4 = a(4-7a+9a^2); \quad R_6 = 2a(2-3a+7a^2)$$

$G=CQ_6(a,a,a)$ DP:

$$\Omega(x) = 2 \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{a-1} x^{(2a-2)+(4a+4)i} + \sum_{i=1}^a x^{2i^2+6i} + 2 \sum_{i=1}^{a-1} x^{2a+(2a+2)i} + \\ & \frac{2a-7-(-1)^a}{4} x^{(2a^2+6a)+4(a-1-i)} \end{aligned} \right]$$

$$+ (2a+2)x^{2a(a+2)} + ax^{4a(a+1)} +$$

$$\frac{3+(-1)^a}{2} x^{(3a^2+4a+\frac{1-(-1)^a}{2})} + 1x^{4a^2+6a-2}$$

$$CI(G) = 400a^6 + \frac{7756}{5}a^5 + \frac{2648}{3}a^4 - \frac{3532}{3}a^3 + \frac{2384}{6}a^2 - \frac{1408}{15}a + 8$$

$$e(G) = |E(G)| = \Omega'(G, 1) = 20a^3 + 40a^2 - 14a + 2$$

$$v(G) = |V(CQ_6_DP)| = 10a^3 + 26a^2 - 4a$$

$$R(4) = 6a^3 + 20a^2 + 18a + 6; \quad R(6) = 10a^3 + 36a^2 + 33a + 12$$

$G=CQ_6(a,a,a)$ TP:

$$\Omega(x) = 2 \left[\begin{aligned} & \sum_{i=1}^a x^{i^2+4i+1} + 3 \sum_{i=1}^{a-1} x^{2a+(4a+2)i} + \frac{2a-7-(-1)^a}{4} \sum_{i=1}^4 x^{a^2+4a+1+2(a-1)i-2i^2} \end{aligned} \right]$$

$$+ \frac{3+(-1)^a}{2} x^{\frac{6a^2+12a+5-(-1)^a}{4}} + 3ax^{2a(a+2)} + 3x^{4a(a+1)}$$

$$CI(G) = 400a^6 + \frac{6969}{5}a^5 + 917a^4 - 650a^3 - 116a^2 + \frac{86}{5}a + 6$$

$$e(G) = |E(G)| = \Omega'(G, 1) = 20a^3 + 36a^2 - 6a - 2$$

$$v(G) = |V(CQ_6_TP)| = 10a^3 + 24a^2 - 2$$

$$R(4) = 6a^3; \quad R(6) = 10a^3 + 3a^2 - 3a + 2$$

Datele din această secțiune se referă la $R_{\max}[6]$. Dacă fețe în loc de inele sunt considerate, polinomul este diferit. Datele au fost calculate cu programul original Nano Studio⁹⁰, dezvoltat la grupul TOPO Cluj. Exemplele sunt date pentru fiecare latice discutată, atât pentru polinoame cât și pentru indici în tabelele următoare.

Tabel 5. 1 Example pentru laticea $CLe_4(a,b,c)$

$CLe_4(a,b,c)$ _atoms	Polinomul Omega	CI_Index
111_24	$6x^6$	1,080
222_144	$12x^{10}+6x^{20}$	54,000
422_272	$4x^{10}+4x^{14}+4x^{18}+6x^{20}+6x^{28}+2x^{36}+2x^{44}$	363,408
442_512	$4x^{14}+8x^{18}+4x^{28}+12x^{36}+4x^{42}+2x^{56}+2x^{80}$	1,353,664
444_960	$12x^{18}+12x^{36}+12x^{54}+6x^{72}$	2,900,448
Polinomul Sadhana		Sd_Index
111_24	$6x^{30}$	180
222_144	$6x^{220}+12x^{230}$	4,080
422_272	$2x^{572}+2x^{580}+6x^{588}+6x^{596}+4x^{598}+4x^{602}+4x^{606}$	16,632
442_512	$2x^{1104}+2x^{1128}+4x^{1142}+12x^{1148}+4x^{1156}+8x^{1166}+4x^{1170}$	41,440
444_960	$6x^{1656}+12x^{1674}+12x^{1692}+12x^{1710}$	70,848

Tabel 5. 2 Example pentru laticea $CQ_4(a,b,c)$

$CQ_4(a,b,c)$ _atoms	Polinomul Omega	CI_Index	
111_32	$4x^6+3x^8$	1,968	
222_208	$32x^6+6x^{24}$	108,288	
331_240	$36x^6+6x^{20}+1x^{48}$	141,456	
332_444	$72x^6+6x^{34}+2x^{48}$	521,688	
333_648	$108x^6+9x^{48}$	1,141,776	
444_1472	$256x^6+12x^{80}$	6,144,000	
Polinomul Sadhana		Sd_Index	
111_32	$3x^{40}+4x^{42}$	288	
222_208	$6x^{312}+32x^{330}$	12,432	
331_240	$x^{336}+6x^{364}+36x^{378}$	16,128	
332_444	$2x^{684}+6x^{698}+72x^{726}$	57,828	
333_648	$9x^{1032}+108x^{1074}$	125,280	
444_1472	$12x^{2416}+256x^{2490}$	666,432	
$CQ_4(a,a,a)$	$e(G)$	$v(G)$	CI_Index
111	48	32	1,968
222	336	208	108,288
333	1,080	648	1,141,776
444	2,496	1,472	6,144,000

Latice construite prin $Op(Trs(P_4(Oct)))$

Latticele de mai jos sunt construite utilizând unitățile proiectate cu secvența $Op(Trs(P_4(Oct)))$, unde Oct este Octaedronul. Rețeaua din rândul de sus al Fig.5.5 a fost făcută prin identificarea (“Id”-net) de fețe opuse ale unităților neoptimizate, astfel apărând ca o rețea mai mult “matematică”. Rețeaua din josul acestei figuri este realizată prin unirea (“Jn”-net) de structuri optimizate energetic, rețeaua fiind mai mult una “chimică”.¹¹³ Aceste rețele arată numai fețe/inele hexagonale și au găuri

largi, ca acelea întâlnite în zeoliți, alumino-silicați naturali larg utilizați în chimia sintetică, ca și catalizatori.

Polinomul Omega a fost evaluat pe un domeniu cubic, formulele analitice fiind listate mai jos.

Exemple sunt date în tabelele de mai jos.

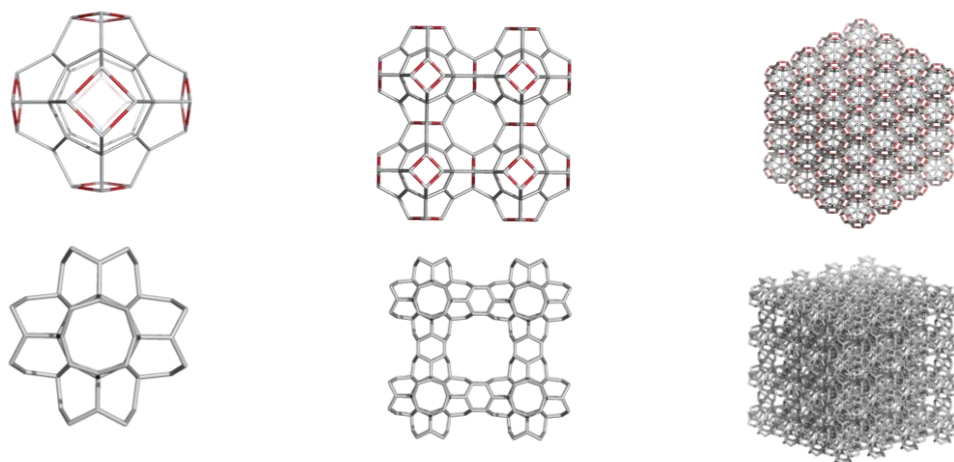


Fig.5. 5 Rândul de sus: Unități proiectate prin $Op(Trs(P_4(Oct)))$ și rețeaua construită prin identificarea (“Id”-net) de fețe opuse în unități neoptimizate, astfel fiind o rețea “matematică”. Rândul de jos: o rețea mai mult chimică construită prin unirea (“Jn”-net) de unități optimizate energetic; coloana din dreapta arată aceste rețele ipotetice în vederea din colț a unui domeniu cubic a,a,a unde a este numărul unităților repetitive pe o anumită direcție a spațiului 3D.

Tabel 5. 3 Exemple de polinoame Omega în $Op(Trs(P_4(Oct)))_{Id}$ rețea cristalină

k	Polinom Omega; $R_{\max}[6]$	v	e	CI
1	$24x^3+6x^4$	68	96	8,904
2	$48x^3+48x^4+48x^5+12x^8$	448	672	448,416
3	$72x^3+162x^4+144x^5+72x^8$	1,404	2,160	4,654,152
4	$96x^3+384x^4+288x^5+216x^8$	3,200	4,992	24,892,032
5	$120x^3+750x^4+480x^5+480x^8$	6,100	9,600	92,104,200
6	$144x^3+1296x^4+720x^5+900x^8$	10,368	16,416	269,387,424

Polinom Omega în $Op(Trs(P_4(Oct)))_{Id}$ rețea cristalină

$$\Omega(R_{\max}[6]; Id, x) = a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5 + a_8x^8$$

$$a_3 = 24k; a_4 = 6a^3; a_5 = 24a(a-1); a_8 = 6k(k-1)^2$$

$$\Omega(R_{\max}[6]; Id, x) = 24ax^3 + 6a^3x^4 + 24a(a-1)x^5 + 6a(a-1)^2x^8$$

$$\Omega'(R_{\max}[6]; Id, 1) = |E(G)| = e(G) = 24a^2(3a+1)$$

$$\Omega''(R_{\max}[6]; Id, 1) = 24a^2(17a-8)$$

$$CI(R_{\max}[6]; Id) = 24a^2(216a^4 + 144a^3 + 24a^2 - 20a + 7)$$

$$v(Id) = 44a^3 + 24a^2$$

Tabel 5. 4 Exemple de polinom Omega în $Op(Trs(P_4(Oct)))_Jn$ rețea cristalină

k	Polinom Omega; $F_{max}[6]$	v	e	CI
1	$24x^3+6x^4$	68	96	8,904
2	$48x^3+60x^4+48x^9$	544	816	660,576
3	$72x^3+216x^4+72x^9+72x^{15}$	1,836	2,808	7,858,728
4	$96x^3+528x^4+96x^9+96x^{15}+96x^{21}$	4,352	6,720	45,077,376
5	$120x^3+1050x^4+120x^9+120x^{15}+120x^{21}+120x^{27}$	8,500	13,200	174,045,000
6	$144x^3+1836x^4+144x^9+144x^{15}+144x^{21}+144x^{27}+144x^{33}$	14,688	22,896	523,826,784

Polinom Omega în $Op(Trs(P_4(Oct)))_Jn$ rețea cristalină

$$\Omega(F_{max}[6]; Jn, x) = a_3x^3 + a_4x^4 + a_3 \sum_{i=2}^k x^{3(2i-1)}$$

$$a_3 = 24k ; a_4 = 6a[a(a-1)/2 + a^2]$$

$$\Omega(F_{max}[6]; Jn, x) = 24ax^3 + 6a[a(a-1)/2 + a^2]x^4 + 24a \sum_{i=2}^a x^{3(2i-1)}$$

$$\Omega'(F_{max}[6]; Jn, 1) = |E(G)| = e(G) = 12a^2(9a-1)$$

$$\Omega''(F_{max}[6]; Jn, 1) = 36a^2(8a^2 + a - 3)$$

$$CI(F_{max}[6]; Jn) = 24a^2(486a^4 - 108a^3 - 6a^2 - 6a + 5)$$

$$v(Jn) = 68a^3$$

Rețele bazate pe grafuri Dyck

Rețelele care fac obiectul acestei secțiuni au fost construite pe unități care sunt reprezentări ale grafului Dyck celebrat.¹¹⁴ Acest graf constă din 32 de vârfuri de valență 3, are 48 de muchii, 12 octogoane R[8], grosime 6, diametrul 5 și numărul cromatic 2; este neplanar și are genul $g = 1$ (adică există o încorporare a grafului pe tor). Numărarea de cicluri pe o reprezentare finită a scos în evidența 12 octogoane și 16 hexagoane. Ca unitate a lăței inficine, arată 12 octogoane și genusul este $g=3$.³

Unitățile de graf Dyck sunt proiectate ca un izomer zig-zag Z-56 (Fig.5.6, stânga) de secvența $Op(Q(C))$, executată pe cubul C în timp ce izomerul armchair A-56(figura, mijloc), de secvența $Op_{2a}(Q(C))$. Există a treia unitate, care face co-rețea cu izomerul A deasupra, proiectat prin $Op_{2a}(Ca(C))$ și notat A-104 (Fig.5.6, dreapta). Toate aceste unități au genusul $g=3$, ultimul fiind o unitate chirală, făcută de operația pro-chirală $Ca = \text{“Capra”}(\text{Rom}) = \text{Goat}(\text{Eng})$. Chiralitatea indusă de operația Ca se apropie de unitate, conform teoriei Petitjean.¹¹⁵

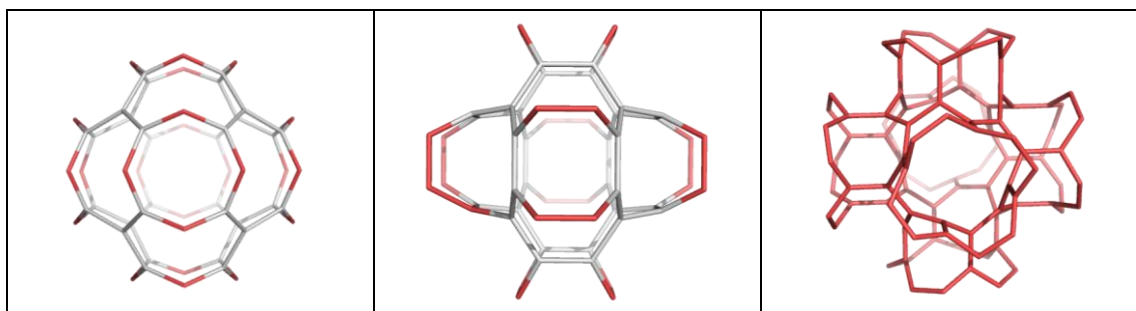


Fig.5. 6 Unități de graf Dyck: zig-zag Z-56, R[8]=12 (stânga); armchair A-56, R[8]=12 (mijloc); armchair A-104, R[8]=24 (dreapta).

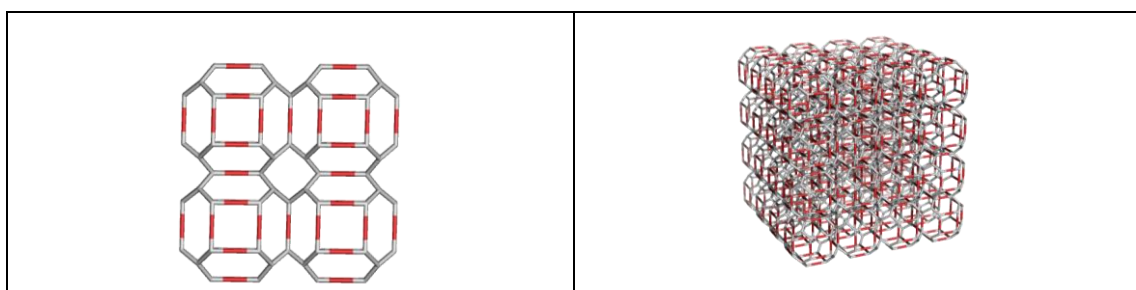


Fig.5. 7 Rețele bazate pe Dyck Z-56 ca o “Id”- latică “mathematica” neoptimizată: 222_352 (stânga) and 444_2432 (dreapta)

Concluzii

O rețea încorporată într-o suprafață de tip P poate fi considerată o decorație a acestei suprafețe; în principiu aparține grupului spațial $Pm-3m$. Dintre multe astfel de rețele P există unele (care au unități repetitive) care sunt reprezentări ale unor structuri celebre de exemplu rețeaua P-(7,3) reprezintă teselarea Klein, în timp ce P-(8,3) este reprezentarea grafului Dyck, ultima fiind înregistrată de TOPO Group Cluj (ca diu8, TOPOS). Construcția acestor rețele/decorațiuni a fost făcută prin utilizarea secvențelor de operații pe mape (implementate în softwareul CVNET) pentru unități repetitive în timp ce asamblarea/încorporarea lor a fost făcut cu ajutorul programului Nano Studio, ambele dezvoltate la grupul TOPO Cluj. Topologia acestor rețele a fost descrisă prin polinomul Omega (de asemenea dezvoltat în Cluj), ca un complement la descrierea clasică cristalografică.

Cap. VI Programe software originale

Contribuțiile personale se referă la implementarea în limbajul de programare C a programelor.

O structură periodică este formată prin repetarea unei structuri de bază (celulă unitară; celulă de bază) prin translatore de-a lungul unei direcții (în cazul structurilor 1-periodice) sau a mai multor direcții (trei direcții pentru structuri 3-periodice). Programele dezvoltate, prezentate în continuare, ajută la găsirea direcțiilor de repetare (atom.c) și la prelucrarea structurii. Programul ahin.c colorează unii atomi din structură pentru a putea vizualiza direcțiile găsite de atom.c Programul hinZalign.c reorientează structura, astfel că direcția dată de un vector specificat devine direcția axei z. Se folosește în special în cazul structurilor 1-periodice.

Programul pentru găsirea vectorilor unitari ai unei structuri periodice:

Dacă s-ar cunoaște structura de bază care prin repetare generează structura periodică și dacă s-ar identifica fiecare instanță a structurii de bază în structura periodică, atunci vectorii care arată distanța și direcția dintre două structuri de bază sunt posibili vectori unitari. Scopul programului este să găsească până la trei vectori unitari, fără a cunoaște și fără a identifica structura de bază. Luând ca referință un atom oarecare, el face parte dintr-o structură de bază. Structura de bază repetându-se, și atomul de referință se repetă și atomii corespunzători sunt oarecum similari cu atomul de referință. Identificând atomii similari atomului de referință, putem calcula vectorii dintre două structuri de bază. Programul face tocmai asta, calculează vectorii unitari după aflarea atomilor similari unui atom de referință.

Modul de folosire al programului este: atom.exe «fișier» «delta» «alpha» [«atom0» [«n»]]. Fișierul «fișier» conține structura cristalină de analizat în format „hin”. «delta» și «alpha» sunt parametrii de toleranță, semnificația lor va deveni clară în cele ce urmează. «atom0» desemnează atomul din structură ce se dorește a fi originea vectorilor care arată direcțiile după care structura de bază se repetă. Dacă «atom0» nu este precizat, fiind parametru opțional, este ales primul atom din structură. Pentru unele criterii de selectare a vectorilor unitari, programul caută până la «n» soluții, implicit «n» se alege 1 dacă nu este specificat.

Concluzii generale

Teoria grafurilor este utilă în descrierea rețelelor cristaline.

Articole recente în domeniul cristalografiei, utilizează tot mai mult teoria grafurilor în descrierea stării cristaline a materiei.

Structurile triplu periodice au fost generate cu ajutorul programelor CVNET²³ și Nano Studio⁹⁰ pe baza operațiilor pe mape.

Au fost generate 69 de rețele cristaline la grupul TOPO Cluj care au fost investigate la Università degli Studi di Milano, sub supravegherea prof. Davide M. Proserpio. Dintre acestea 39 sunt originale, structuri noi care au fost înregistrate sub numele diu1, diu 2 etc.

Investigarea s-a facut cu ajutorul programelor originale atom, ahin si hinzalign, hin2off si TOPOS, ultimul fiind dezvoltat la Universitatea din Samara, Rusia, de către grupul prof. Vladislav Blatov.

Structurile care arată 1 periodicitate, pot fi asociate cu rețele cvasicristale, având simetrie axială. Topologia acestor structuri a fost prezentată în termeni cristalografici .

Bibliografie:

1. M. V. Diudea, *Nanomolecules and Nanostructures*, Polynomials and Indices, Kragujevac, 2010.
2. M. V. Diudea, O. Ivanciuc, *Topologie moleculară*, Ed. Complex Cluj, 1995.
3. F. Harary, *Graph Theory*, Addison-Wesley, Reading, M.A., 1969.
4. J. J. Sylvester, *On an application of the new atomic theory to the graphical representation of the invariants and covariants of binary quantics - with three appendices*, Am. J. Math. 1874, 1, 64-90.
5. N. Trinajstić, *Chemical Graph Theory*, CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida, 1983.
6. D. König, *Theorie der endlichen und unendlichen Graphen*. Leipzig, 1936. Reprinted Chelsea, New York, 1950.
7. L. B. Kier, L.H. Hall, *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research*, Acad. Press, 1976.
8. A. T. Balaban, P. Filip, *Computer program for topological index J (average distance sum connectivity)*, MATCH, Commun. Math. Comput. Chem., 1984, 16, 163-190.
9. T. Ionescu, *Grafuri-Aplicații*, Ed. Ped. Bucharest, 1973.
10. L. Euler, *Elementa doctrinae solidorum et demonstratio nonnullarum insignium proprietatum quibus solida heddris planis inclusa sunt praedita*, Novi Comment. Acad. Sci. I. Petropolitanae, 1758, 4, 109-160.
11. K. Kuratowski, *Sur le problème des courbes gauches en topologie*, Fund. Math. 1930, 15, 271-283.
12. M. H. Klin, N.S. Zefirov, *Group theoretical approach to the investigation of reaction graphs for highly degenerate rearrangements of chemical compounds. II. Fundamental concepts*. MATCH, Commun. Math. Comput. Chem., 1991, 26, 171-190.
13. D. Oprescu, L. Bejan, V. Patrascu, *Informatică*, Ed. Niculescu, București, 2001.
14. E. Cayley, *Phil. Mag.*, 67 (1874) 444.
15. C. Berge, *Teoria Grafurilor și Aplicațiile Ei*, Ed. Tehnică, București, 1969.
16. L. B. Kier, L. H. Hall, *Molecular Connectivity in Chemistry and Drug Research*, Acad. Press, 1976.

17. M. V. Diudea, I. Gutman, L. Jäntschi, *Molecular Topology*, NOVA, New York, 2002.
18. M. V. Diudea, M. S. Florescu, P. V. Khadikar, *Molecular Topology and Its Applications*, EFICON, Bucharest, 2006.
19. M. Deza, P. W. Fowler, M. Shtorgin, and K. Vietze, *Crystal nets as graphs: Terminology and definitions*, *J. Chem. Inform. Comp. Sci.*, 2000, 40, 1325-1332.
20. P. W. Fowler and T. Pisanski, *Leapfrog transformations and polyhedra of Clar type*, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 1994, 90, 2865-2871.
21. D. J. Klein and H. Zhu, *All-conjugated carbon species*, in: *From Chemical Topology to Three - Dimensional Geometry*, (Ed. A. T. Balaban), Plenum Press, New York, 1997, 297-341.
22. B. de La Vaissière, P. W. Fowler, and M. Deza, *Codes in Archimedean and Catalan polyhedra*, *J. Chem. Inform. Comp. Sci.* 2001, 41, 376-386.
23. M. Stefu and M. V. Diudea, *CageVersatile_CVNET*, Babes-Bolyai Univ., Cluj, 2005.
24. L. Euler, *Solutio Problematis ad Geometriam Situs Pertinentis*, *Comm. Acad. Scient. Imp. Petrop.*, 1736, 8, 128-140.
25. T. Pisanski and M. Randić, *Bridges between geometry and graph theory*, *Geometry at Work*, MAA Notes, 2000, 53, 174-194.
26. M. V. Diudea, *Nanostructure design-between science and art*, in: M. Putz, Ed., NOVA, 2010, Chap. 17, 409-465.
27. M. V. Diudea, *Covering Forms in Nanostructures*, *Forma* (Tokyo), 2004, 19, 3, 131-163.
28. G. HART, <http://www.georgehart.com/sculpture>
29. V. Eberhard, *Zur Morphologie der Polyeder*, Leipzig, Teubner, 1891.
30. P. W. Fowler, *Carbon cylinders: a class of closed-shell clusters*, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 1990, 86, 2073-2077.
31. P. W. Fowler, *Fullerene graphs with more negative than positive eigenvalues: The exceptions that prove the rule of electron deficiency?*, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 1997, 93, 1-3.
32. P. W. Fowler, *How unusual is C₆₀? Magic numbers for carbon clusters*, *Chem. Phys. Lett.*, 1986, 131, 444-450.

33. P. W. Fowler, T. Pisanski, A. Graovac, and J. Žerovnik, *A classification of centrally-symmetric and cyclic 12-vertex triangulations of S^2* , DIMACS, 2000, 51, 175-187
34. P. W. Fowler and K. M. Rogers, *Eigenvalue relations for decorated trivalent polyhedra Connections between the fullerenes and their fulleren-ylene and spheriphane relatives*, J. Chem. Soc. Faraday Trans., 1998, 94, 1019-1027.
35. P. W. Fowler and K. M. Rogers, *Eigenvalue spectra of leapfrog polyhedral*, J. Chem. Soc. Faraday Trans., 1998, 94, 2509-2514.
36. P. W. Fowler and J. I. Steer, *The leapfrog principle: a rule for electron counts of carbon clusters*, J. Chem. Soc., Chem. Comm., 1987, 1403-1405.
37. M. V. Diudea, *Nanostructures, Novel Architecture*, Ed Nova, N. Y., 2005.
38. M. V. Diudea and Cs. L. Nagy, *Periodic Nanostructures*, Springer, 2007.
39. M. V. Diudea and P. E. John, *Covering polyhedral tori*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem., 2001, 44, 103-116.
40. M. V. Diudea, P. E. John, A. Graovac, M. Primorac, and T. Pisanski, *Leapfrog and Related Operations on Toroidal Fullerenes*, Croat. Chem. Acta, 2003, 76, 153-159.
41. M. V. Diudea, M. Ştefu, P. E. John, and A. Graovac, *Generalized operations on maps*, Croat. Chem. Acta, 2006, 79, 355-362.
42. A. E. Vizitiu, M. V. Diudea, S. Nikolić and D. Janežić, *Retro-leapfrog and related retro map operations*, J. Chem. Inform. Mod., 2006, 46, 2574-2578.
43. M. Goldberg, *A class of multi-symmetric polyhedra*, Tôhoku Math. J., 1937, 43, 104-108.
44. M. V. Diudea, *Capra-a leapfrog related operation on maps*, Studia Univ. "Babes-Bolyai", 2003, 48, 2, 3-16.
45. M. V. Diudea, *Nanoporous Carbon Allotropes by Septupling Map Operations*, J. Chem. Inf. Model., 2005, 45, 1002-1009.
46. R. B. King and M. V. Diudea, *From the cube to the Dyck and Klein tessellations: Implications for the structures of zeolite-like carbon and boron nitride allotropes*, J. Math. Chem., 2005, 38, 4, 425-435.
47. R. B. King and M. V. Diudea, *The chirality of icosahedral fullerenes: a comparison of the tripling (leapfrog), quadrupling (chamfering), and septupling (capra) transformations*, J. Math. Chem., 2006, 39, 597-604.

48. El-Basil, *Combinatorial Self-Similarity*, Croat. Chem. Acta, 1996, 69,1117-1148.
49. D. J. Klein, T. P. Živković, and A. T. Balaban, *The fractal family of coronenes*, MATCH, Comm. Math. Comp. Chem., 1993, 29, 107-130.
50. M. Ştefu, M. V. Diudea and P. E. John, *Composite operations on maps*, Studia Univ. "Babes-Bolyai", 2005, 50, 2, 165-174.
51. H. S. M. Coxeter, *Regular polytopes*, Methuen and Co., 1948; 3rd Ed., Dover Pubs, Dover, 1973.
52. T. Petrişor, *Electronica solidului, Fizica II, Reţeaua cristalină. Forţe interatomice*, Universitatea Tehnica Cluj-Napoca.
http://www.msl.utcluj.ro/down/Curs%206_7.pdf
53. E. Luca, G. Zet, C. Ciubotariu, A. Păduraru, *Fizica Generală*, Editura Didactică şi Pedagogică, Bucureşti, 6, 1981.
54. C. Kittel, *Introducere în fizica corpului solid*, Ed. Tehnică, Bucureşti, 2,1972.
55. I. Cosma, *Fizica*, Institutul Politehnic Cluj-Napoca, 14, 1984.
56. L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio, *Networks, Topologies, and Entanglements*, Making Crystals by Design: Methods, Techniques and Applications, Wiley-VCH, 2007, 61-67.
57. (a) A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry*, 5th edn., Oxford University Press, Oxford 1984; (b) A. F. Wells, *Three-dimensional Nets and Polyhedra*, Wiley, New York 1977; (c) A. F. Wells, *Further Studies of Three-dimensional Nets*, ACA monograph 8, 1979.
58. (a) J. V. Smith, *Chem. Rev.* 1988, 88, 149; (b) J. V. Smith, *Tetrahedral Frameworks of Zeolites, Clathrates and Related Materials*, Landolt-Börnstein New Series IV/14 Subvolume A, Springer, Berlin 2000.
59. (a) M. O'Keeffe, N. E. Brese, *Acta Crystallogr. Sect. A* 1992, 48, 663; (b) M.O'Keeffe, *Acta Crystallogr. Sect. A* 1992, 48, 670; (c) M. O'Keeffe, *Acta Crystallogr., Sect. A* 1995, 51, 916.
60. (a) H. Sowa, E. Koch, *Acta Crystallogr., Sect. A* 2005, 61, 331; (b) W. Fischer, *Acta Crystallogr., Sect. A* 2005, 61, 435.
61. (a) M. M. J. Treacy, K. H. Randall, S. Rao, J. A. Perry, D. A. Chadi, Z. *Kristallogr.* 1997, 212, 768; (b) M. M. J. Treacy, I.Rivin, E. Balkovsky, K. H. Randall, M. D.Foster, *Microporous Mesoporous Mater.* 2004, 74, 121.

62. S. J. Chung, Th. Hahn, W. E. Klee, *Acta Crystallogr. Sect. A* 1984, 40, 42; W. E. Klee, *Cryst. Res. Technol.* 2004, 39, 959; J.-G. Eon, *Acta Crystallogr. Sect. A* 2005, 61, 501.
63. O. Delgado-Friedrichs, M. O'Keeffe, *J. Solid State Chem.* 2005, 178, 2480.
64. J. W. Essam, M. E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* 1970, 42, 272.
65. (a) O. Delgado-Friedrichs, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Acta Crystallogr., Sect. A* 2003, 59, 22; (b) O. Delgado Friedrichs, M. O'Keeffe, O. M. Yaghi, *Acta Crystallogr., Sect. A* 2003, 59, 515.
66. (a) C. Baerlocher, W. M. Meier, D. H. Olsen, *Atlas of Zeolite Framework Types*, Elsevier, Amsterdam, 2001; (b) <http://www.iza-structure.Org/databases/> ; (c) M. M. J. Treacy, *Microporous Mesoporous Mater.* 2003, 58, 1.
67. N. W. Ockwig, O. Delgado-Friedrichs, M. O'Keeffe and O. M. Yaghi, *Acc. Chem. Res.* 2005, 38, 176.
68. M. O'Keeffe, B. G. Hyde, *Philos. Trans.R. Soc. London, Ser. A* 1980, 295, 553.
69. M. O'Keeffe, S. T. Hyde, *Zeolites* 1977, 19, 370.
70. V. A. Blatov, L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio, *CrystEngComm.* 2004, 6, 377.
71. I. A. Baburin, V. A. Blatov, L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio, *J. Solid State Chem.* 2005, 178, 2452.
72. TOPOS 4.0 <http://www.topos.ssu.samara.ru>
73. E. Flapan, *When Topology Meets Chemistry*, Cambridge University Press, Cambridge 2000.
74. L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio, *Coord. Chem. Rev.* 2003, 246, 247.
75. L. Carlucci, G. Ciani, D. M. Proserpio, *CrystEngComm* 2003, 5, 269.
76. E. Koch, H. Sowa, *Acta Crystallogr., Sect.A* 2004, 60, 239; W. Fischer, *Acta Crystallogr., Sect. A* 2004, 60, 246.
77. O. Delgado-Friedrichs, M. D. Foster, M. O'Keeffe, D. M. Proserpio, M. M. J. Treacy, O. M. Yaghi, *J. Solid State Chem.* 2005, 178, 2533.
78. (a) O. Delgado-Friedrichs, M. O'Keeffe, *Acta Crystallogr., Sect. A* 2003, 59, 351; (b) O. Delgado-Friedrichs, *Nova Acta Leopold. NF*, 2003, 88, 39; (c) O. Delgado-Friedrichs, *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 2912, Springer,

- Berlin, 2004, p.178; (d) O. Delgado-Friedrichs, *Discrete Comput. Geom.* 2005, 33, 67.
79. M. O’Keeffe, M. Eddaoudi, H. Li, T. Reineke, O. M. Yaghi, *J. Solid State Chem.* 2000, 152, 3.
80. (a) R. Robson, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 2000, 3735; (b) O. M. Yaghi, M. O’Keeffe, N. W. Ockwig, H. K. Chae, M. Eddaoudi, J. Kim, *Nature* 2003, 423, 705.
81. M. O’Keeffe, B. G. Hyde, *Crystal Structures I: Patterns and Symmetry*, Mineralogical Society of America, Washington 1996.
82. V. A. Blatov & D. M. Proserpio, *program package for multipurpose crystallochemical analysis TOPOS*, Version 4.0, Practical manual 1.0.5, 2011
83. O. Delgado-Friedrichs, M. D. Foster, M. O’Keeffe, D. M. Proserpio, M. M. J. Treacy, O. M. Yaghi, *What do we know about three-periodic nets?*, *Journal of Solid State Chemistry*, Volume 178, Issue 8, August 2005, 2533-2554.
84. O. Delgado-Friedrichs, M. O’Keeffe, *Acta Crystallogr. A* 59, 2003, 351-360.
85. V. A. Blatov, M. O’Keeffe and D. M. Proserpio, *Vertex-, face-, point-, Schläfli-, and Delaney-symbols in nets, polyhedra and tilings: recommended terminology*, *CrystEngComm*, 2010,12, 44-48.
86. V. A. Blatov and D. M. Proserpio, *Periodic-Graph Approaches in Crystal Structure Prediction*, *Modern Methods of Crystal Structure Prediction*, Wiley-VCH, 2011, 1-28.
87. M. O’Keeffe, M. A. Peskov, S. J. Ramsden, and O. M. Yaghi, *The Reticular Chemistry Structure Resource (RCSR) Database of, and Symbols for, Crystal Nets*, *Accounts of Chemical Research*, 41,12, 2008, 1782-1789.
88. *Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D.*
<http://www.jmol.org/>
89. *The Gavrog Project, 3dt*, gavrog.org
90. C. L. Nagy, M. V. Diudea, *Nano-Studio*, Babeş-Bolyai Univ, Cluj Napoca, 2009.
91. L. Bendersky, *Quasicrystal with one-dimensional translational symmetry and a tenfold rotation axis.*, *Phys Rev Lett* 55:1461–1463, 1985.
92. B. Szeffler, M. V. Diudea, *Polybenzene revisited.*, *Acta Chim Slov* 59:795-802, 2012.

93. B. Szeffler, M. V. Diudea, *Polybenzene multitori*, Central Eur J Chem 10:1779-1785, 2012.
94. B. Szeffler, O. Ponta, M. V. Diudea *Energetics of polybenzene multi tori*. J Molec Struct 1022:89-93, 2012.
95. M. V. Diudea, *Quasicrystals: between spongy and full space filling*, in M. V. Diudea and Cs. L. Nagy Eds, *Diamond and related nanostructures*, Springer, Chap. 19., 2013.
96. M. V. Diudea, A. Ilić, *All-pentagonal face multi tori*, J. Comput. Theor. Nanosci. 8:736-739, 2011.
97. J. Breza, M. Kadlečikova, M. Vojs, M. Michalka, M. Vesely, T. Danis, *Diamond icosahedron on a TiN-coated steel substrate*, Microelectron J, 35:709–712, 2004.
98. A. Bende, M. V. Diudea, *Energetics of multi-shell cages*, in M. V. Diudea and Cs. L. Nagy Eds, *Diamond and related nanostructures*, Springer, Chap. 6., Dodrecht., 2013.
99. M. V. Diudea, C. L. Nagy *All pentagonal ring structures related to the C20 fullerene: Diamond D5.*, Diam Relat Mater 23:105–108, 2012.
100. M. V. Diudea, *Omega polynomial in all $R[8]$ lattices*. Iran J Math 1: 69-77, 2010.
101. P. E. John, A. E. Vizitiu, S. Cigher, M. V. Diudea, *CI index in tubular nanostructures*. MATCH Commun. Math Comput Chem 57:479-484, 2007.
102. D. Ž. Djoković, *Distance preserving subgraphs of hypercubes*. Combin J Theory Ser. B 14:263-267, 1973.
103. P. M. Winkler *Isometric embedding in products of complete graphs*. Discrete Appl Math 8:209-212, 1984.
104. S. Klavžar, *Some comments on Co graphs and CI index.*, MATCH Commun Math Comput Chem 59: 217-222, 2008.
105. M. V. Diudea, S. Klavžar, *Omega polynomial revisited.*, Acta Chem Sloven 57:565-570, 2010.
106. M. V. Diudea, *Omega Polynomial.*, Carpath J Math 22:43-47, 2006.
107. M. V. Diudea, S. Cigher, P. E. John, *Omega and related counting polynomials*, MATCH Commun Math. Comput. Chem. 60:237-250, 2008.

108. M. V. Diudea, S. Cigher, A. E. Vizitiu, M. S. Florescu, P. E. John, *Omega polynomial and its use in nanostructure description.*, J Math Chem 45: 316-329, 2009.
109. A. R. Ashrafi, M. Ghorbani, M. Jalali, *Computing Sadhana polynomial of V-phenylenic nanotubes and nanotori*, Indian J. Chem. 47A: 535–537, 2008.
110. P. V. Khadikar, S. Joshi, A. V. Bajaj, D. Mandloi, *Correlations between the benzene character of acenes or helicenes and simple molecular descriptors*, Bioorg Med Chem Lett 14:1187- 1191 , 2004.
111. M. Saheli, M. Mehtari Arani, B. Szeffler *Omega polynomial in ast-crystal structure*. Studia Univ. Babes-Bolyai, Chemia, 57(3): 000-000, 2012
112. M.V. Diudea, A.E. Vizitiu, S. Cigher, *Omega and related polynomials in crystal-like structures.*, MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 65:131-142, 2011.
113. M. V. Diudea and A. Ilić, *Omega polynomial in crystal-like single-type face/ring networks*, Int. J. Chem. Model., 2010, 3, 65-71.
114. W. Dyck *Ueber Aufstellung und Untersuchung von Gruppe und Irrationalität regulärer Riemann'sher Flächen*. *Mathematische Ann.* 17:473-509, 1880.
115. M. V. Diudea, Petitjean M *Symmetry in multi tori.*, Symmetry Culture Sci. 19 (4): 285-305, 2008.
116. M. V. Diudea, K. Nagy, M. L. Pop, F. Gholami-Nezhaad, and A.R. Ashrafi, *Omega and PIV polynomial in Dyck graph-like Z(8)-unit networks*, Int. J. Nanosci. Nanotechnol., 2010, 6, 97-103.
117. M. V. Diudea, G. Katona, B. Pârv, *Delta Number, DA , of Dendrimers*, Croat Chem Acta 70:509-517, 1997.
118. M. V. Diudea, G. Katona, *Molecular Topology of Dendrimers*. In: Newkome, G.A. Ed. *Advan. Dendritic Macromol.* 4: 135-201, 1999.
119. M. Stefu, V. Bucila, M. V. Diudea, *Omega polynomial in P-type surface networks*, Studia Univ. Babes-Bolyai, Chemia, 2010, 55 (4), 211-214.
120. B. Szeffler, M. Saheli, M. V. Diudea, *Sumanene units in P-type surface networks*, Acta Chim Slo. 59: 177–182, 2012.
121. F. Klein, *Vorlesungen über das Ikosaeder*. Teubner, Leipzig, 1884: Part I, Chapter II.
122. F. Klein, *Gesammelten Mathematischen Abhandlungen*. Springer Verlag, Berlin, 1923, Vol. 3, pp. 90-136.