

Расширенные информационные индексы каркасных кристаллических структур

Научный руководитель – Аксенов Сергей Михайлович

Банару Дарья Александровна

Сотрудник

Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия

E-mail: banaru@phys.chem.msu.ru

По С.В. Кривовичеву [1], количество структурной (шэнноновской) информации, входящей в кристалле на один атом, равно $^{str}I_G = -\sum p_i \cdot \log_2 p_i$ (бит/атом), где $p_i = m_i/v$, m_i - кратность i -ой занятой кристаллографической орбиты, или число атомов в конкретной позиции Уайкова в приведенной элементарной ячейке. Общее количество информации в расчете на приведенную элементарную ячейку $^{str}I_{G,tot}$ (бит/эл.яч.) в v раз больше.

Количество "химической" информации, проистекающей из состава минерала $E^{(1)}_{c1} \dots E^{(k)}_{ck}$, где $E^{(i)}$ - i -й химический элемент, а c_i - индекс в простейшей формуле вещества, выражается следующим образом [2]: $^{chem}I_G = -\sum p_i \cdot \log_2 p_i$ (бит/эл.яч.), где $p_i = c_i/e$, e - общее число атомов в простейшей формуле вещества. Суммарное количество информации в простейшей формуле $^{chem}I_{G,tot}$ (бит/формула) в e раз больше.

Недавно было предложено дополнить информационную сложность кристаллической структуры так называемой координационной сложностью [3], рассчитываемой тоже через шэнноновский функционал при $p_i = a_i/A$, где a_i - число степеней свободы (арность) i -ой занятой орбиты, $A = \sum a_i$. По аналогии с H_{coor} традиционная информационная сложность $^{str}I_G$ автором [3] была названа комбинаторной (H_{comb}), а их взвешенная сумма - конфигурационной сложностью (H_{conf}): $H_{conf} = H(M, A) + M/(M + A) \cdot H_{comb} + A/(M + A) \cdot H_{coor}$; $H(M, A) = -M/(M + A) \cdot \log_2(M/(M + A)) - A/(M + A) \cdot \log_2(A/(M + A))$; $H_{conf,tot} = (M + A) \cdot H_{conf}$, где $M = v$ (в обозначениях С.В. Кривовичева). Фактически H_{comb} характеризует распределение атомов по занятым орбитам, H_{coor} - распределение занятых орбит по поступательным степеням свободы, а H_{conf} учитывает оба распределения. Аналогичным образом можно дополнить конфигурационную сложность химической и получить общую кристаллохимическую сложность кристаллической структуры H_{crys} : $H_{crys} = H(M, A, C) + 1/(M + A + C) \cdot (MH_{comb} + AH_{coor} + CH_{chem})$; $H(M, A, C) = -1/(M + A + C) \cdot (M \log_2(M/(M + A + C)) + A \log_2(A/(M + A + C)) + C \log_2(C/(M + A + C)))$; $H_{crys,tot} = (M + A + C) \cdot H_{crys}$, где $C = \sum c_i$ в простейшей формуле соединения, $H_{chem} = ^{chem}I_G$.

В докладе впервые приводятся результаты расчета H_{comb} , H_{conf} и H_{crys} для нескольких серий каркасных кристаллических структур, таких как цеолиты, цирконосиликаты, боробериллаты. Результаты расчета показывают, что расширенные индексы H_{conf} и H_{crys} обладают гораздо большей дискриминационной способностью в отношении родственных структур, чем H_{comb} .

Источники и литература

- 1) Krivovichev S. Topological complexity of crystal structures: quantitative approach // Acta Cryst. 2012. V. A68. P. 393–398.
- 2) Siidra O.I., Zenko D.S., Krivovichev S.V. Structural complexity of lead silicates: Crystal structure of Pb₂₁[Si₇O₂₂]₂[Si₄O₁₃] and its comparison to hytttsjöite // Am. Mineral. 2014. V. 99. P. 817–823.

- 3) Hornfeck W. On an extension of Krivovichev's complexity measures // Acta Cryst. 2020. V. A76. P. 534–548.