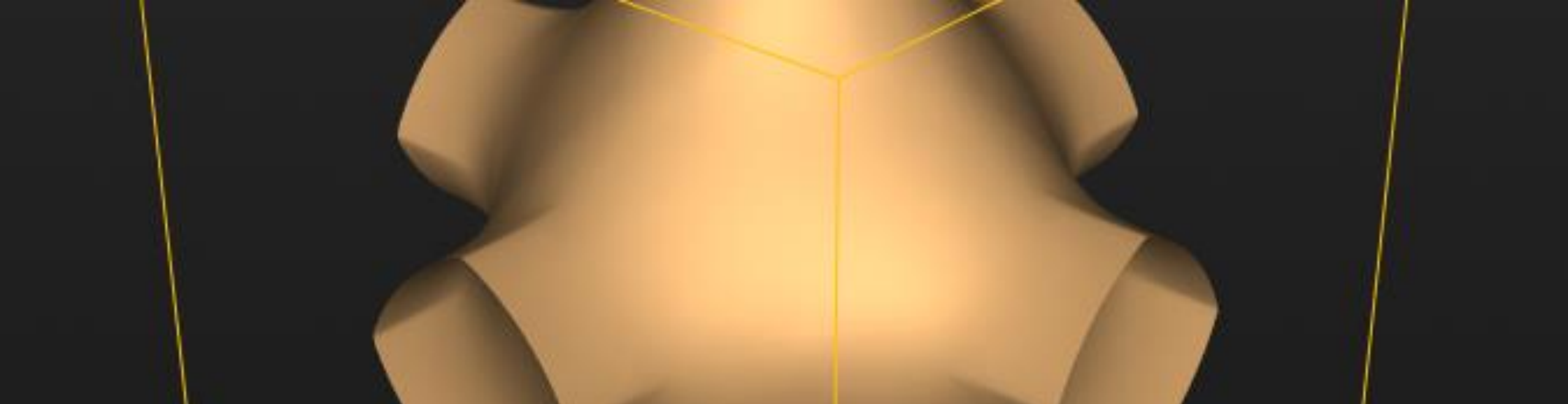


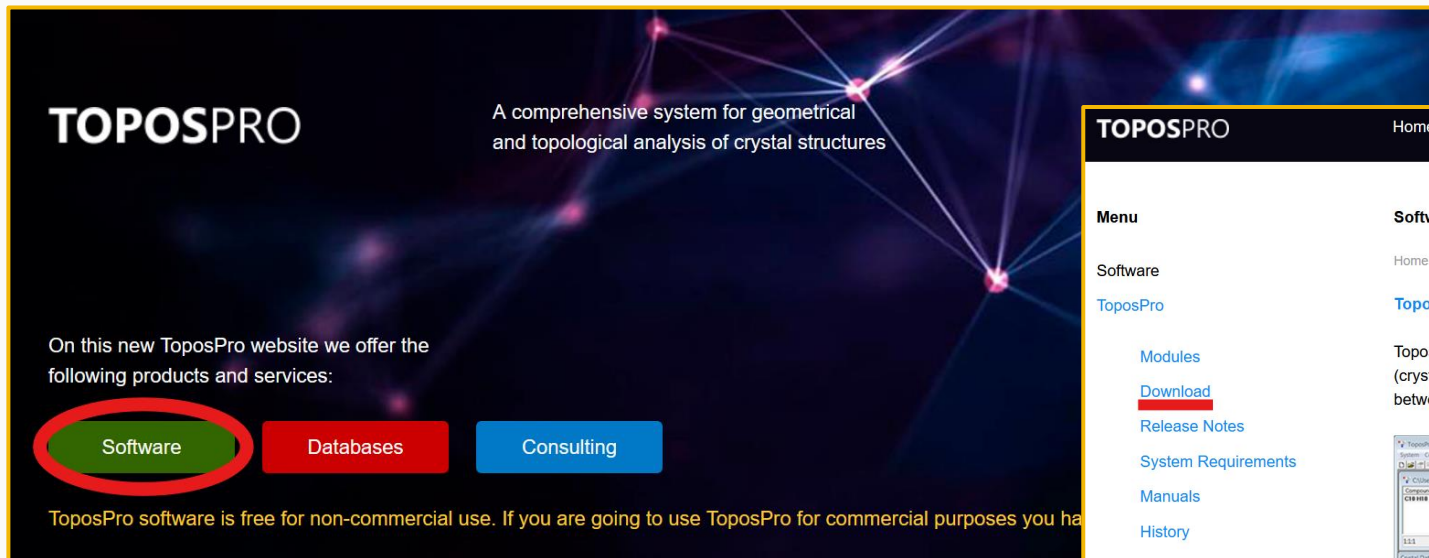


Метод генерации пористых структур из атомных сеток кристаллов

Мастер-класс · ICME 2026 · 8 октября 2026

Необходимые материалы

ToposPro 5.6.0.0 – <https://topospro.com/> – Заполните форму и установите



TOPOS PRO[Home](#)[Software](#)[Databases](#)[Consulting](#)[FAQ](#)

Menu
[Software](#)
[ToposPro](#)

[Modules](#)
[Download](#)
[Release Notes](#)
[System Requirements](#)
[Manuals](#)
[History](#)

Software
[Home / Software](#)

ToposPro 5.6.0.0

ToposPro is a program package for comprehensive analysis of geometrical and topological properties of periodic structures (crystals, networks, tilings). ToposPro was tailored to process large samples of crystallographic data and to find correlations between structure parameters.

<https://p3d.topcryst.com/news/icme-2026/>



Porous 3D v2

Архив на странице
мастер-класса

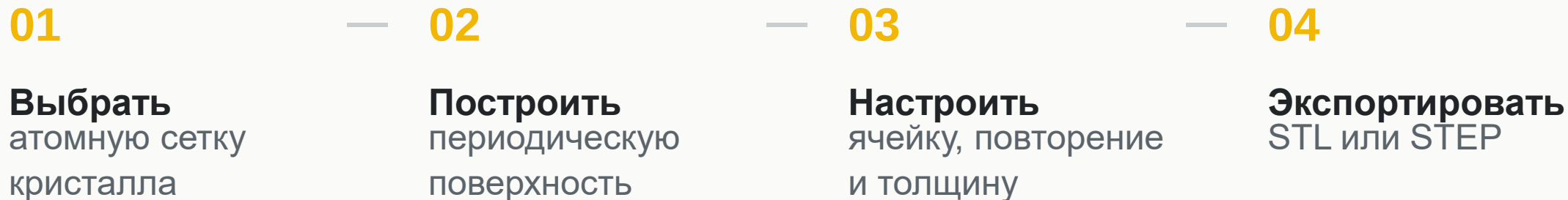
База примеров

Архив Example Database

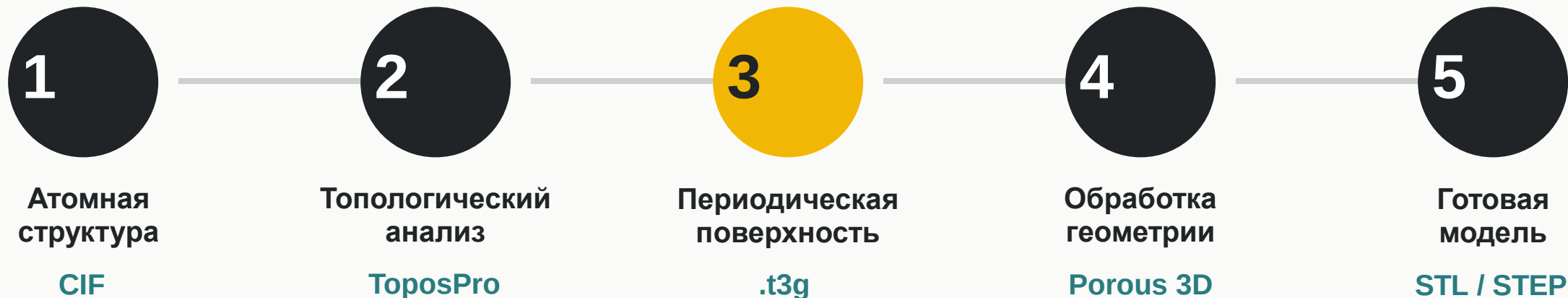
Подготовка к занятию

- Установите TorosPro
- Распакуйте Porous 3D в отдельную папку.
- Скачайте и распакуйте Example Database.
- Подготовьте папку для файлов .t3g и экспортов.

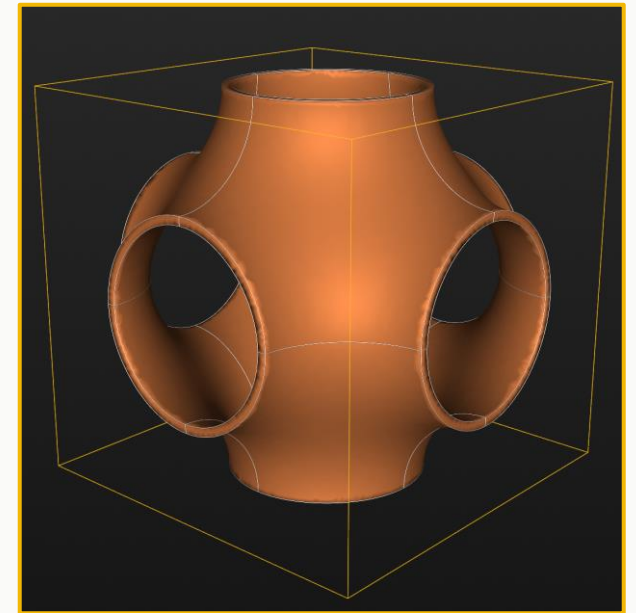
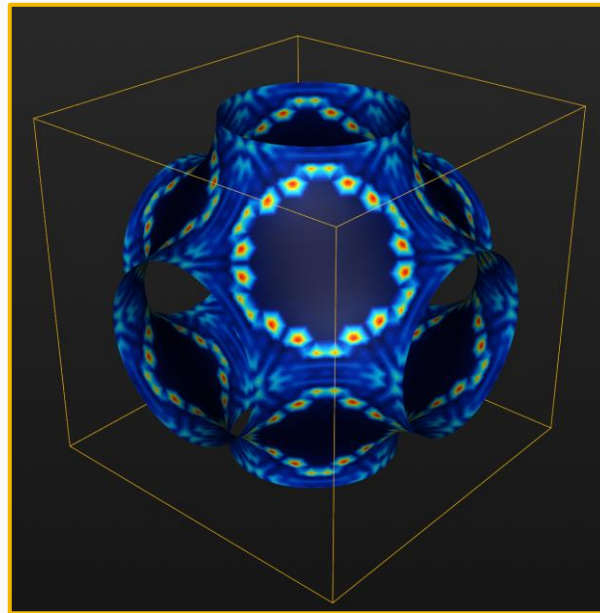
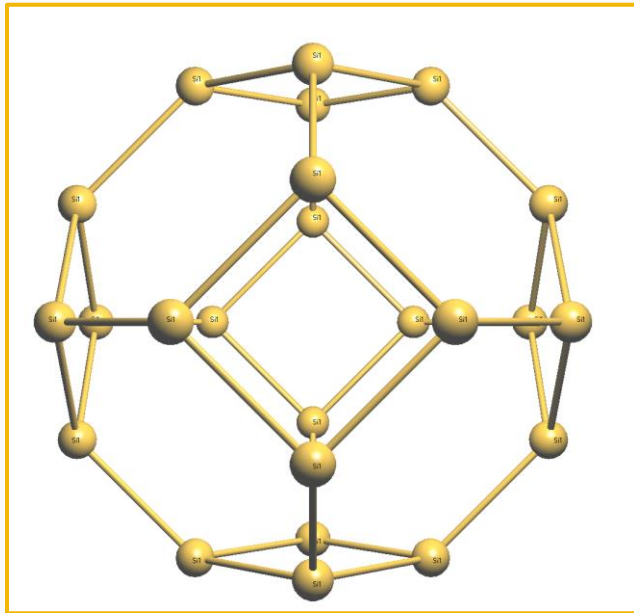
План мастер-класса



Маршрут от кристалла к модели

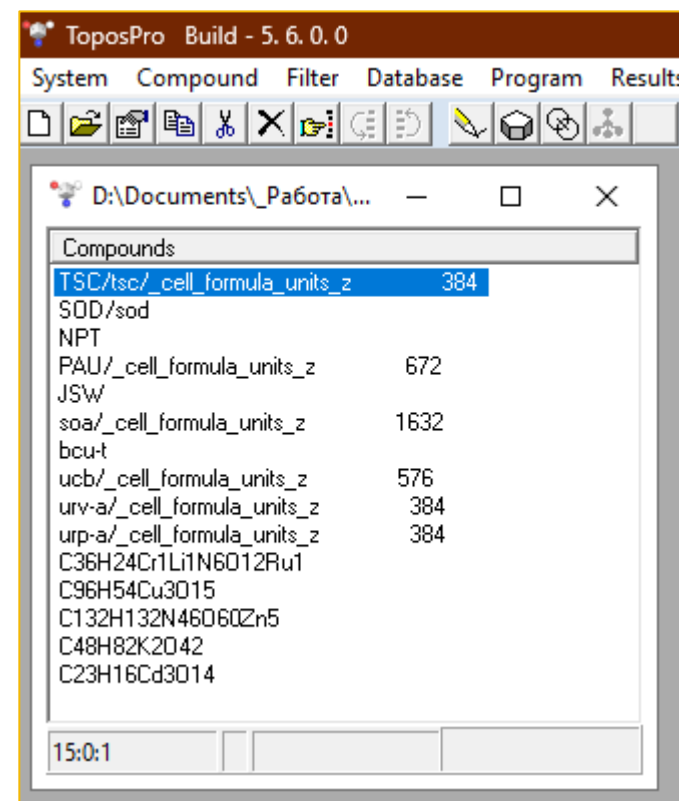
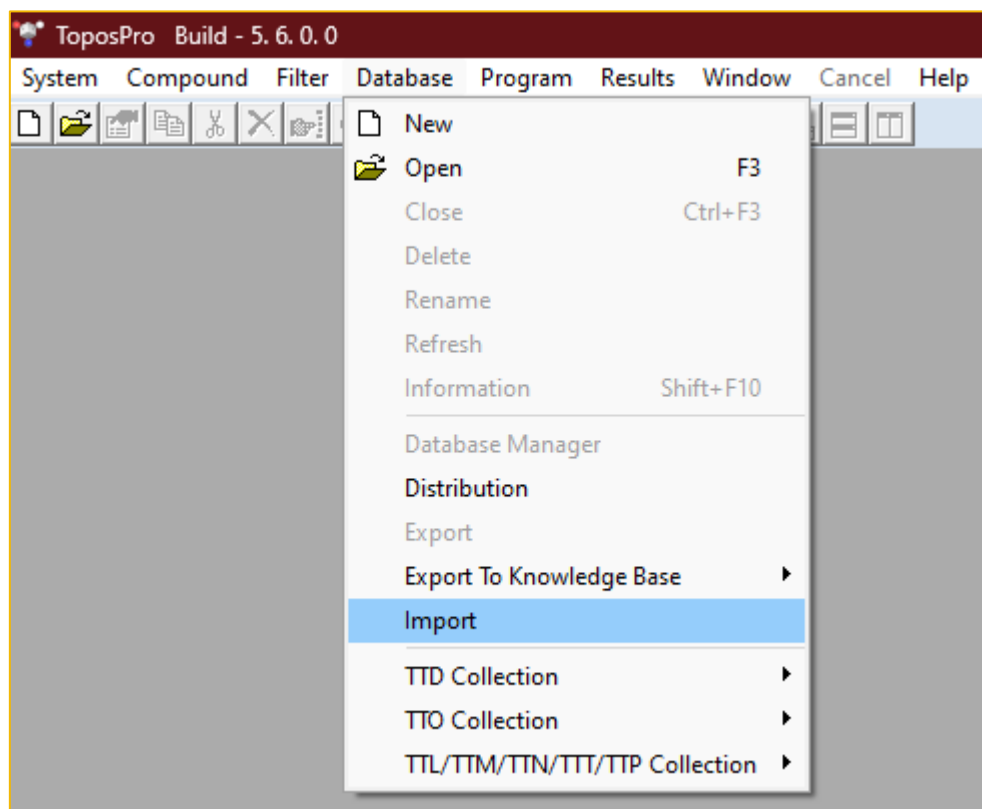


Пример получения модели пористой поверхности на основе цеолита SOD



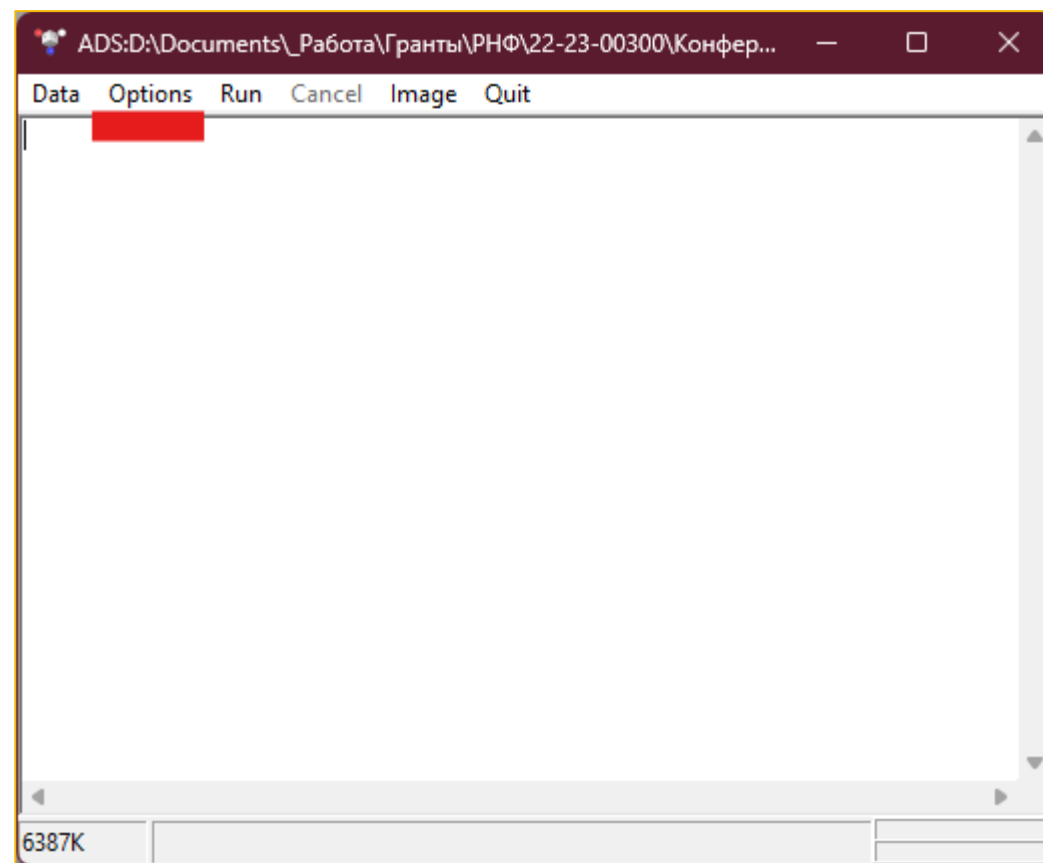
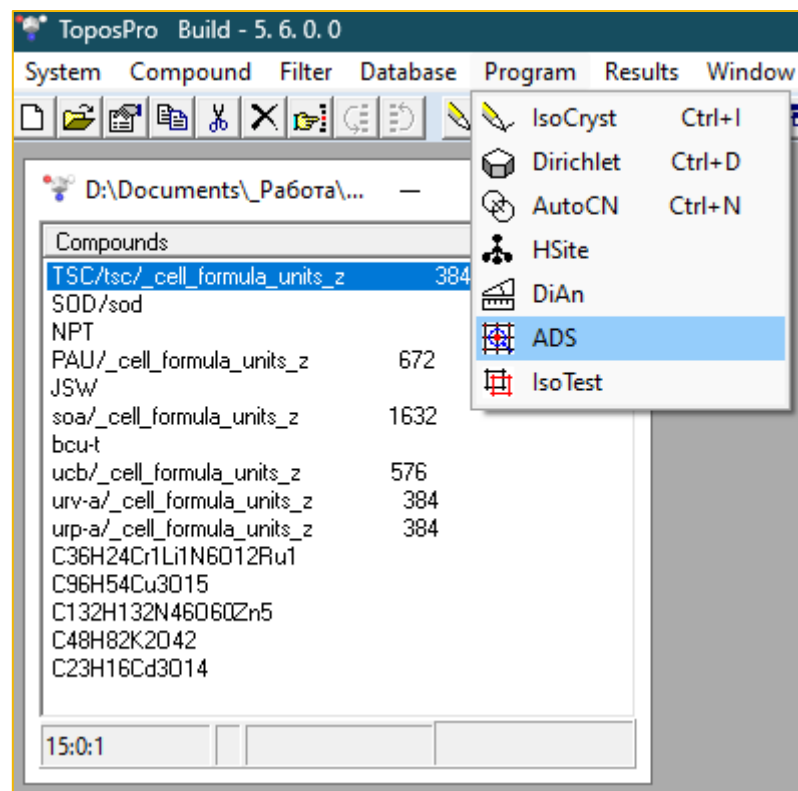
Как получить файл .t3g в ToposPro

Шаг 1. Импортируем базу данных



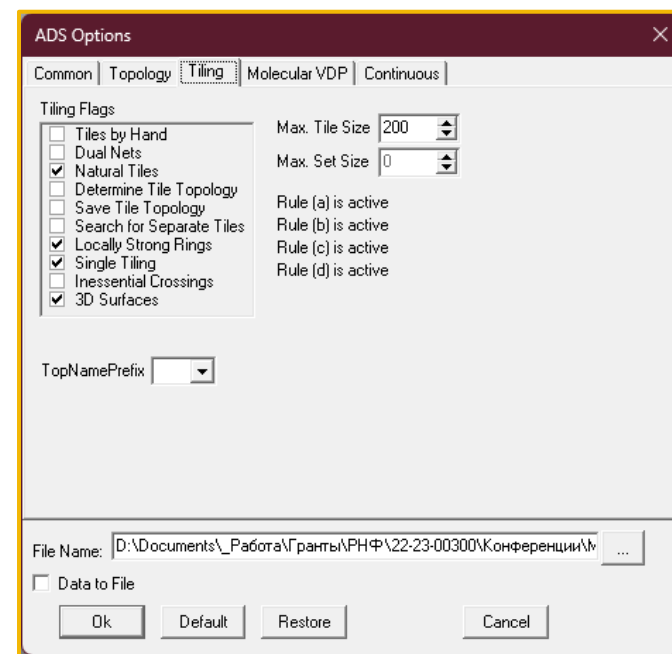
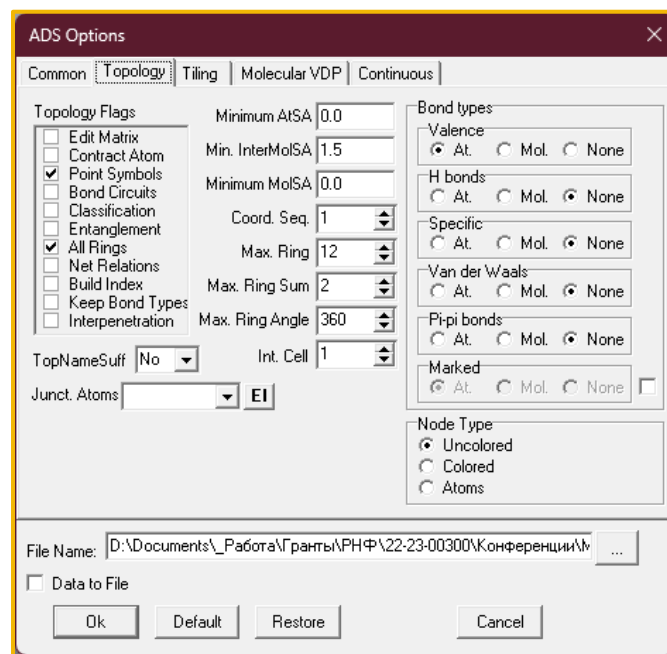
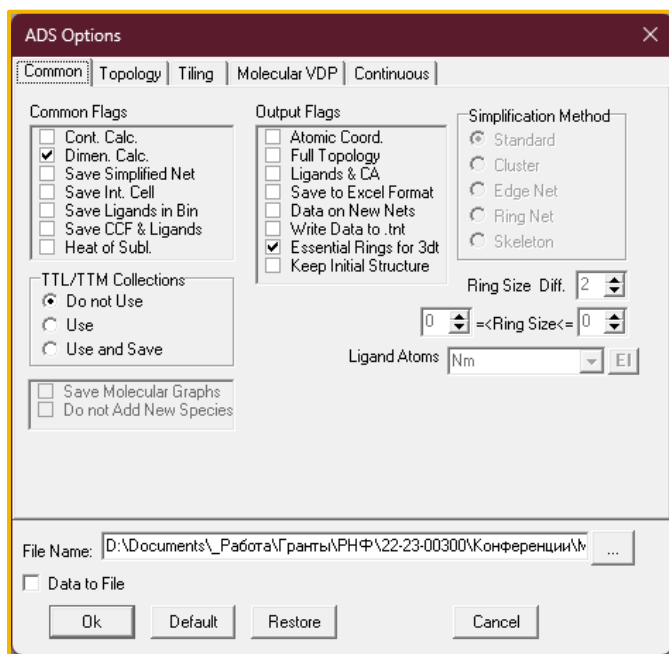
Как получить файл .t3g в ToposPro

Шаг 2. Настройка параметров ADS



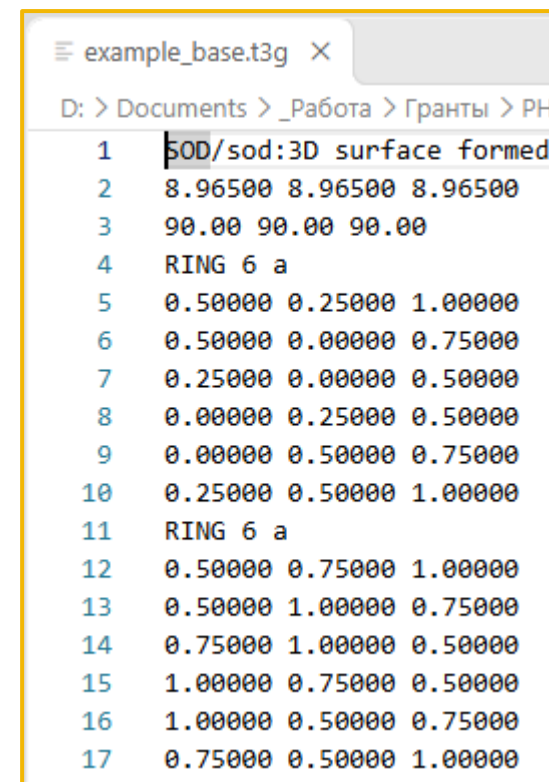
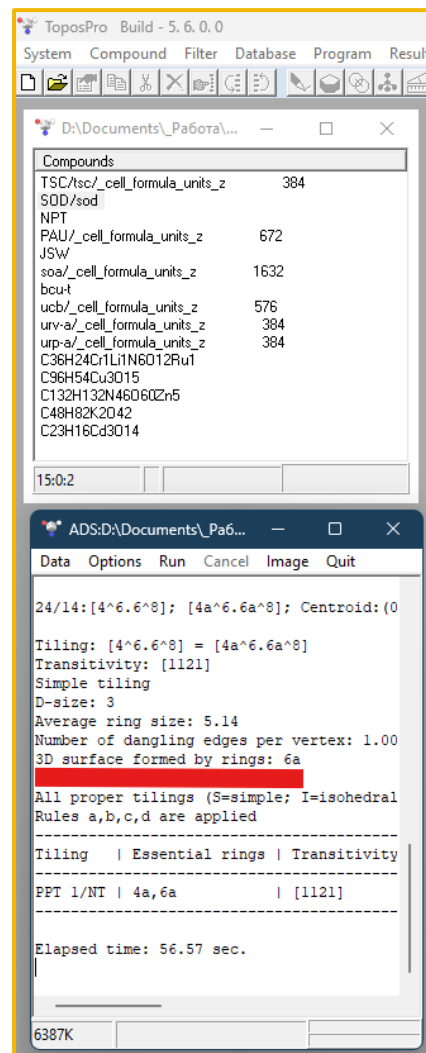
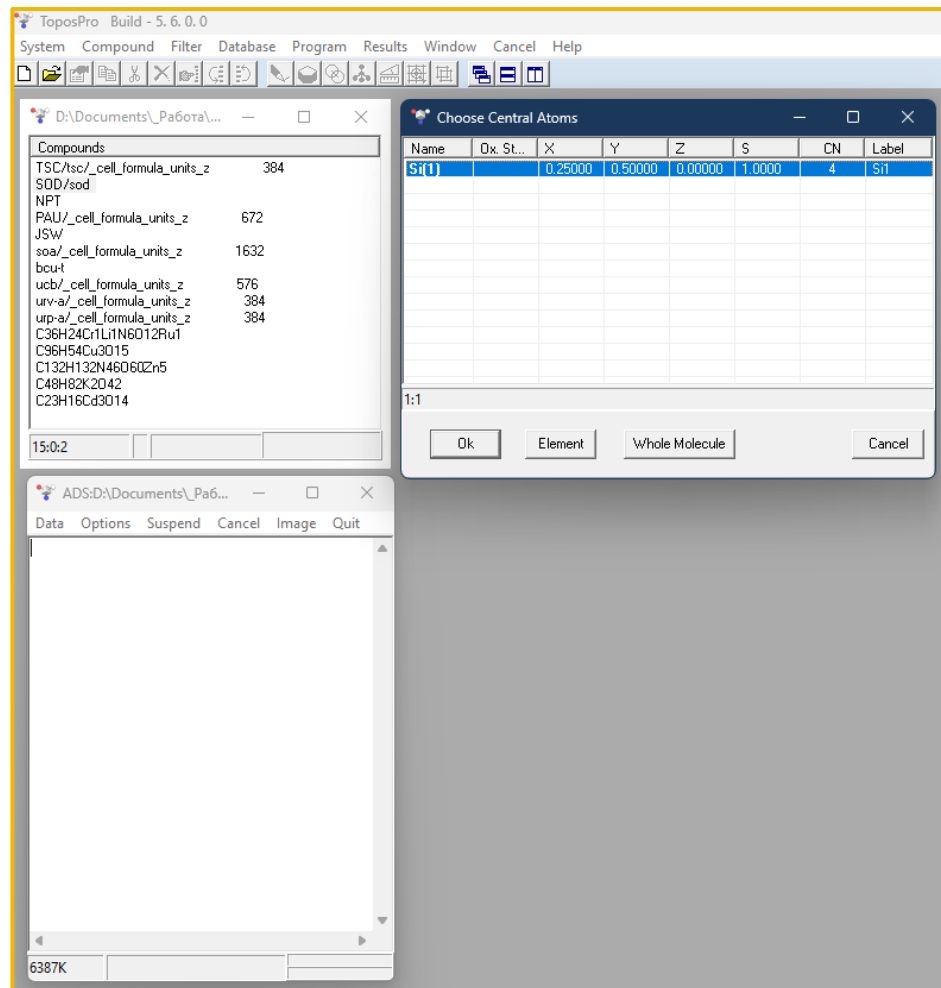
Как получить файл .t3g в ToposPro

Шаг 2. Настройка параметров ADS



Как получить файл .t3g в ToposPro

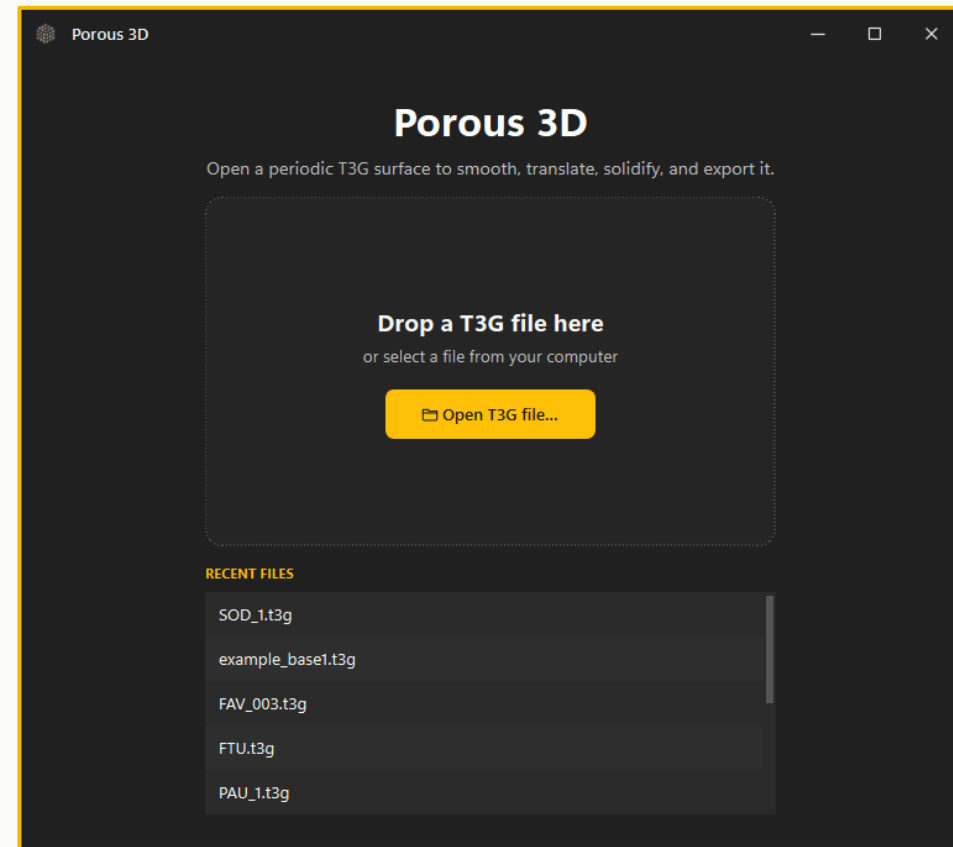
Шаг 3. Генерация поверхности



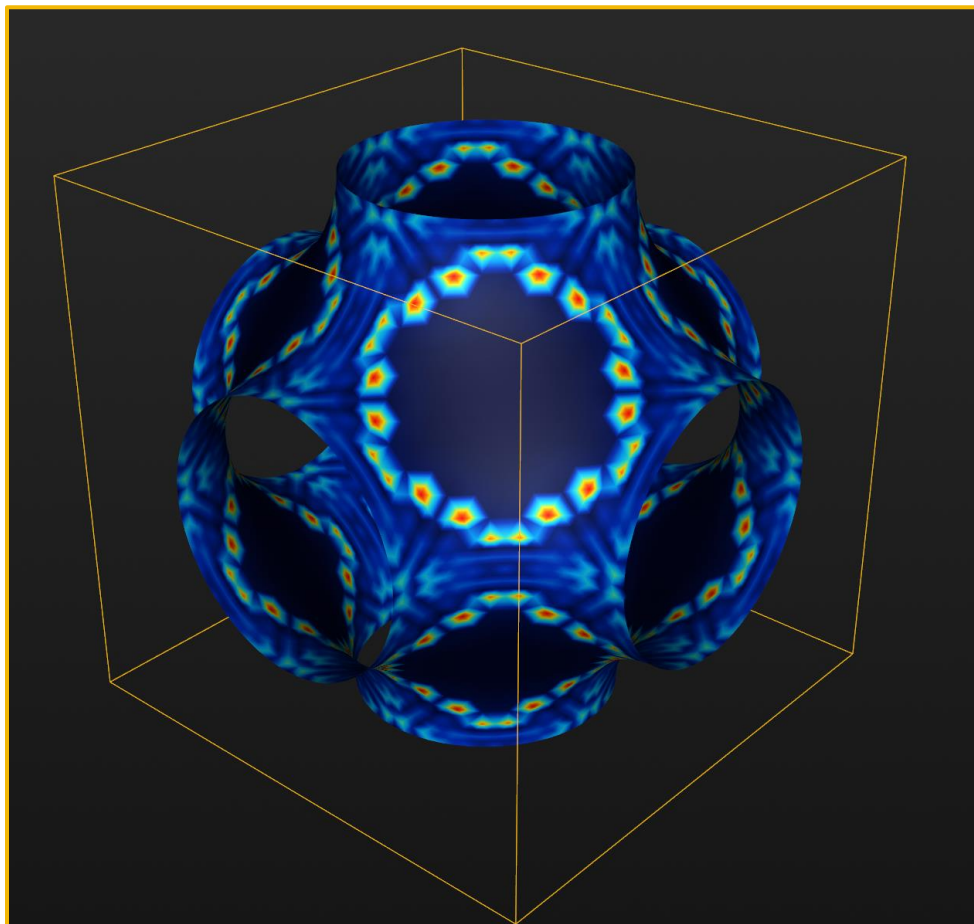
Открытие файла .t3g в Porous 3D

- Запустите Porous 3D.
- Выберите Open T3G и укажите файл поверхности.
- Дождитесь чтения и автоматического сглаживания.
- Проверьте имя поверхности, ячейку и топологические параметры.

Если файл содержит несколько структур, выберите нужную структуру в левом меню.



Проверка и сглаживание поверхности

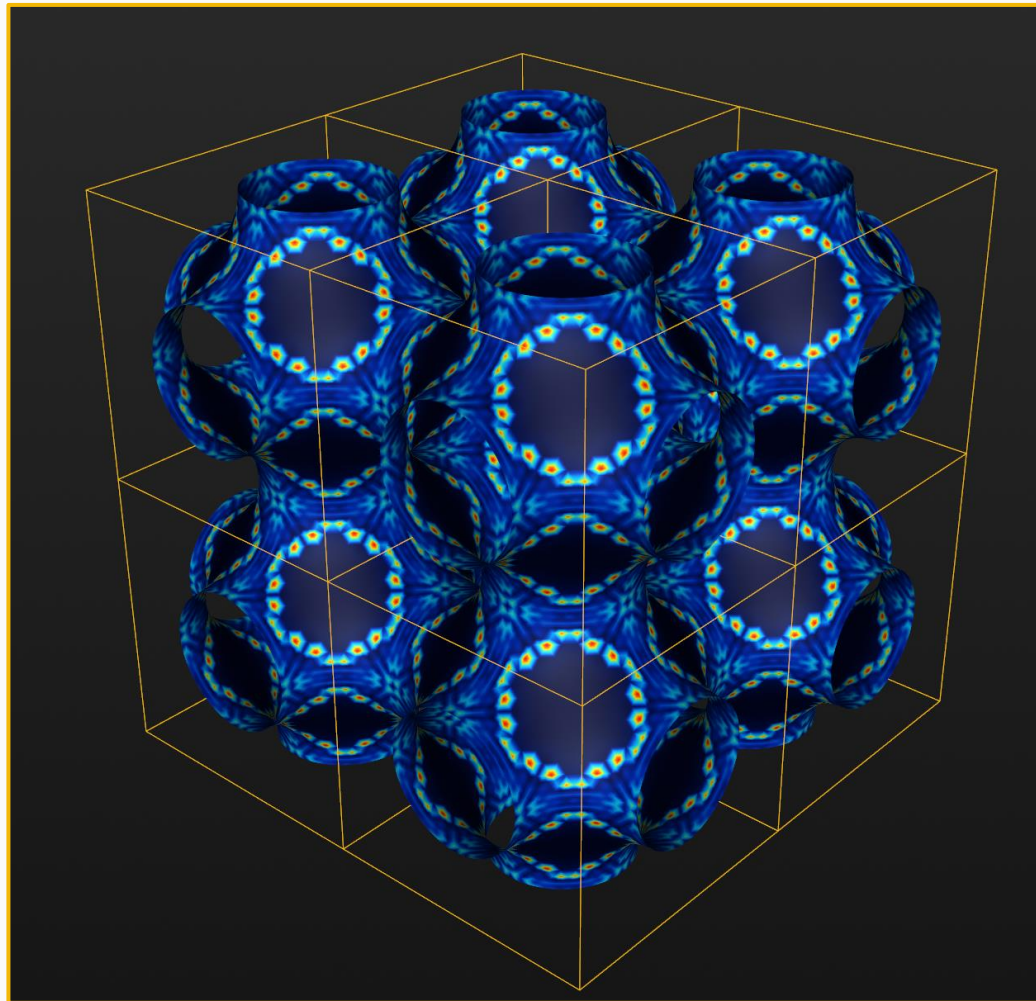


Что проверить

- Поверхность непрерывно пересекает границы ячейки.
- Важные каналы и перемычки сохранились после сглаживания.
- Сетка не содержит заметных самопересечений и разрывов.
- Размер ячейки соответствует задаче моделирования.

Сравните исходную и сглаженную сетку перед дальнейшими операциями.

Трансляция и размер образца



Основные параметры

A, B, C

Число повторений
элементарной ячейки по
трьём направлениям.

U, V, W

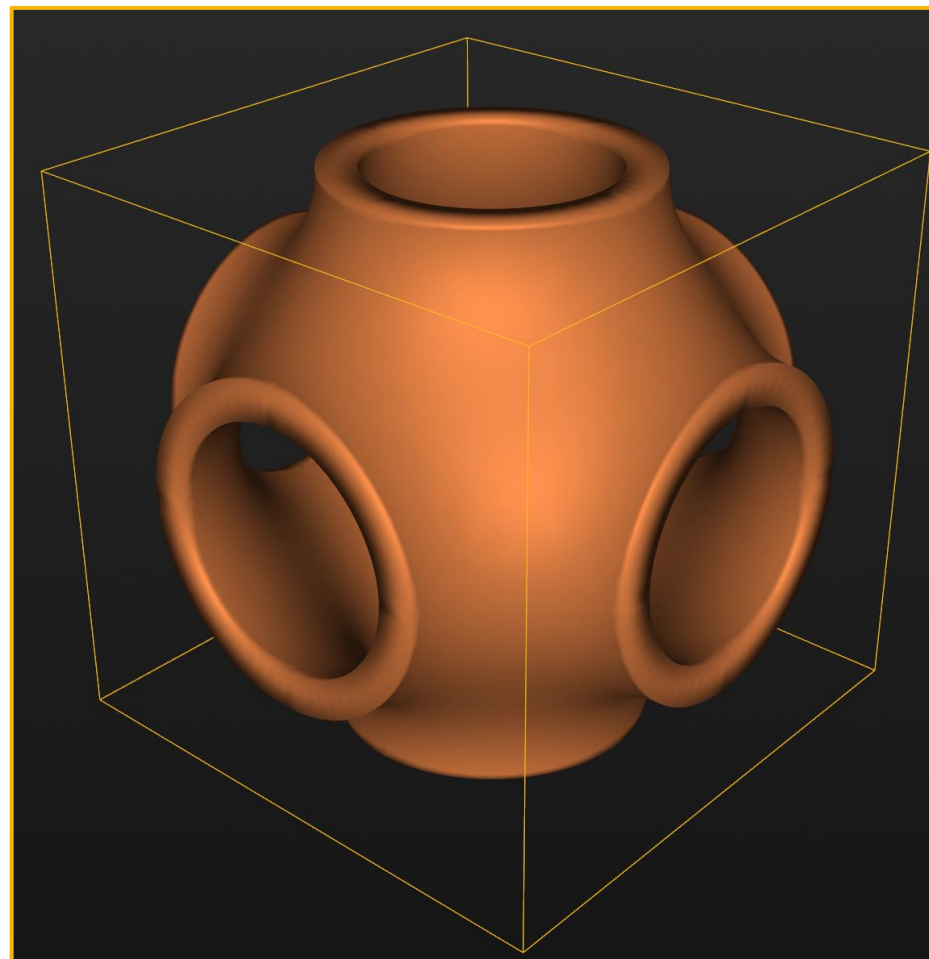
Дробный фазовый сдвиг
поверхности внутри
фиксированной области.

**Начните с $1 \times 1 \times 1$, затем
увеличивайте массив
постепенно.**

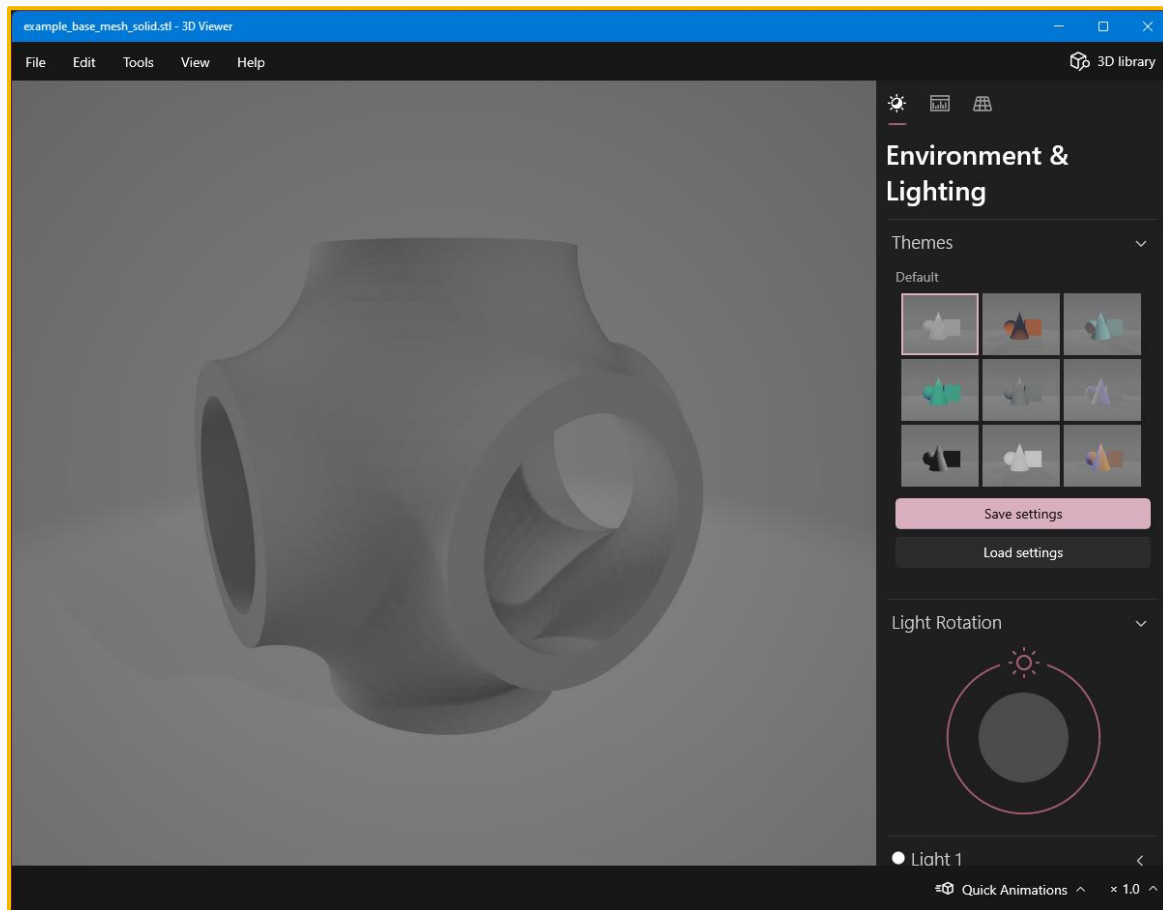
Толщина и построение твёрдого тела

- 1 Задайте полную толщину стенки в физических единицах.
- 2 Выберите способ построения с учётом требуемого формата.
- 3 Сгенерируйте тело и проверьте статус геометрии.

При пересечениях уменьшите толщину или смените метод построения.



Экспорт результата



STL

Для треугольной сетки и подготовки к 3D-печати.

STEP

Для твёрдотельной модели и дальнейшей работы в CAD.

Перед сохранением проверьте масштаб, число ячеек и выбранный метод построения.

Практическое задание

Для одного примера подготовьте два варианта модели и сравните результат.

A Простой вариант

1 × 1 × 1 ячейка
минимальная безопасная
толщина
STL и STEP

B Сложный вариант

2 × 2 × 2 ячейки
та же относительная толщина
STL, STEP + Формула

Сохраните скриншот поверхности, параметры ячейки, толщину и итоговый STL и STEP

Готовый результат должен открываться в программе просмотра сеток или CAD без ошибок геометрии.