Аннотация.

Предлагаемый межфакультетский курс «Симметрия кристаллического микромира с применением алгоритмов машинного обучения» представляет собой изложение фундаментальных симметрийных законов, управляющих строением минералов или синтетических кристаллов, применяемых в качестве материалов. В его основе лежит курс «Теории симметрии кристаллов», читаемый на кафедре кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета на протяжении десятилетий, сформированный академиком Н.В.Беловым и его учениками и изложенный в учебнике Ю.К Егорова-Тисменко и Г.П. Литвинской. В курсе будут рассмотрены основные операции и элементы симметрии, конечные как отправные и бесконечные, начиная от самих элементов симметрии микромира через одномерно-бесконечные постройки (бордюры), двумерно-бесконечные (слои) с привлечением графики Эшера до трехмерных Федоровских групп. Их рассмотрение будет проведено последовательно от ромбических к тетрагональным, кубическим и гексагональным пространственным группам. Особенностью изложения материала является рассмотрение взаимосвязи сингоний при выведении пространственных групп, а также выведение двух общих законов взаимодействия элементов симметрии и трансляций решетки. Лекции будут иллюстрироваться моделями структур минералов и кристаллов неорганических соединений из уникальной коллекции кафедры кристаллографии. Слушатели знакомятся с двуцветными Шубниковскими группами симметрии кристаллов – т.е. с основными представлениями учения об антисимметрии, которое находит применение в описании магнитных свойств кристаллов. Будут также упомянуты многоцветные группы симметрии Белова. После освоения симметрийных законов, будут предложены для ознакомления фундаментальные принципы выявления модели структуры с использованием программных комплексов SHELXS и PLATON, а также современные компьютерные подходы к созданию алгоритмов машинного обучения для выявления взаимосвязи состав-структура-свойства.

Курс может представить интерес для студентов и аспирантов геологических, химических и физических специальностей Московского университета, а также для всех, интересующихся пространственным строением твердых тел.

Вопросы по межфакультетскому курсу «Симметрия кристаллического микромира с применением алгоритмов машинного обучения».

1. Элементы симметрии I и II рода как операции конечных фигур, группа симметрии, координатные системы, категории и сингонии; международная символика.
2. Трансляция как основной элемент симметрии, ее взаимодействие с осями и плоскостями макромира при параллельном расположении, реестр микроэлементов симметрии.
3. Действие перпендикулярной трансляции на плоскости и оси симметрии всех порядков. Косая трансляция как частный случай двух основных.
4. Взаимодействие плоскостей различных типов под углом 90° и 45°, возникающие группы.
5. Группы симметрии бордюров и их вывод с использованием принципа Кюри. Группы симметрии слоев и их вывод в аналогии с бордюрами, графики плоских групп и умение вывести группу на основе узора. Плоские орнаменты Бюргера.
6. Решетки Бравэ для всех сингоний.
7. Основной принцип вывода пространственных групп на основе ромбической гемиэдрии для Р-решетки Бравэ, примеры вывода групп с С-, А-, I-, F-решетками.
8. Принцип построения чертежа группы. Понятия «правильной системы точек», ее величины симметрии, кратности, степени свободы.
9. Разнообразие установок голоэдрических ромбических групп и принцип вывода Белова. Понятие групп-подгруппа для связи с гемиэдрией. Примеры экзотических групп (*Fddd*). Представление об осевых группах.
10. Классный вывод тетрагональных голоэдрических групп и особенности вычерчивании графиков.
11. Вывод голоэдрических групп из ромбических путем тетрагонализации на примере голоэдрических групп.
12. Принцип вывода кубических пространственных групп на основе ромбических путем кубизации в классе *m*3. Примеры построения графиков.
13. Принцип вывода кубических пространственных групп на основе тетрагональных. Примеры построения графиков.
14. Классный вывод гексагональных голоэдрических пространственных групп; соотношение группа-подгруппа в дальнейшем выводе. Особенности *P* и *R* решеток Бравэ.
15. Наиболее популярная группа для структур с плотнейшими упаковками.
16. Переход от кубических к тригональным группам.
17. Понятие антисимметрии как введение четвертой переменной в описание симметрии кристаллов. Закон АА=К, возможные двуцветные оси, примеры двуцветных точечных групп и их иллюстрация.
18. Принцип зацвечивания подрешеточных элементов симметрии и введение цветной трансляции, одномерные группы антисимметрии.
19. Плоские группы антимимметрии, графики двуцветных групп и Беловские мозаики антисимметрии.
20. Цветные решетки Бравэ и примеры групп ромбической гемиэдрии, графики.
21. Кристаллоструктурные иллюстрации Белова для структур типа АВ.
22. Понятие о многоцветных группах Белова, многоцветные мозаики.
23. Пятерные оси в кристаллографии: симметрия икосаэдрических многогранников,

фуллерены, нанотрубки- новые материалы

1. Квазикристаллы.
2. Псевдосимметрия в кристаллографии.
3. Возможность предсказания структур с использованием симметрийных законов строения
4. Принципы выявления моделей структур и корректной симметрии с помощью программных комплексов.
5. Принципы создания алгоритмов машинного обучения для предсказания свойств кристаллов. Понятие структурных дескрипторов.

Программа курса

«Симметрия кристаллического микромира с применением алгоритмов машинного обучения»

1. История создания пространственных групп симметрии и их значение для исследования структур кристаллов. Русская школа кристаллографии. Работы Федорова, Шенфлиса. Базовые симметрические операции – ось, зеркальная плоскость и центр инверсии: I и II роды преобразований, представления симметрических операций: модельный, координатный и матричный; положения теории групп. Трансляции. Реестр винтовых осей и скользящих плоскостей *a,b,c,n,d.* Взаимодействие трансляций и других элементов симметрии между собой.

2. Вывод одномерных групп, иллюстрации бордюров. Двумерные плоские группы: выбор ячейки, возможности центрировок. Вывод 17 групп на основе принципа Кюри: крючёченые (лепестковые) точечные группы и их взаимодействие с решетками с образованием узоров. Орнаменты Бюргера, узоры Эшера.

3. Вывод 14 решеток Бравэ на основе принципа Кюри, а именно: сочетание координатного репера каждой из сингоний с голоэдрической симметрией точечных групп для *Р*-решеток, возможные дополнительные центрировки. Принцип вывода пространственных групп класса *mm*2 – простейшие графики, понятия выбора начала координат, правильные системы точек (орбиты), величины симметрии, кратности позиции, инвариантные, моно-, ди-, тривариантные точки. Изображение групп в Интернациональных таблицах на основе подхода Федорова.

4. Ромбические голоэдрические и осевые группы, основные представления. Примеры структур ромбических кристаллов: графики групп и структуры AgNO2, FeS2 марказит, PdCl2, CaCO3 арагонит, I2, Na2SO4 тенардит; задачи на восстановление структуры из проекции с выведение группы и позиций атомов.

5. Тетрагональная сингония – классный вывод на основе комбинаций микроэлементов симметрии в каждой из точечных групп в возможных решетках Бравэ: 16 голоэдрических с *Р*-решеткой, группы с *I*-решеткой и гемиэдрия как подгруппы. Особенности тетрагональных графиков, связь тетрагональных и ромбических групп – примеры тетрагонализации. Примеры структур тетрагональных кристаллов: графики групп и структуры TiO2 рутил, CuFeS2 халькопирит, Cu2FeSnS4 станнин, ZrSiO4 циркон, ThCl4, BPO4, PCl5.

6. Кубические группы как производные ромбических и тетрагональных путем кубизации. Способы представления групп в кристаллографическом атласе. Примеры структур кубических кристаллов: графики групп и структуры FeS2 пирит, NiAsS герсдорфит, (CH2)6N4 уротропин, Cu12Sb4S13 тетраэдрит, ZnS сфалерит, C алмаз, MgAl2O4 шпинель, As4O6 арсенолит, Ca3Al2[SiO4]3 гранат.

7.Особенности гексагональной сингонии – меньшие возможности выбора микроэлементов симметрии для сочетаний в группе, винтовые оси и расположение винтов перпендикулярных осей 2. Примеры структур кристаллов: графики групп и структуры: NiAs никелин, C-лонсдейлит, CdI2, SiO2-кварц, Hg-ртуть, Al2O3-корунд, СаСО3-кальцит. Моноклинная сингония и вариации в выборе осей и установок: FeAsS арсенопирит, CuO тенорит. Частота встречаемости пространственных групп – статистика и причины.

8. История вопроса об антисимметрии и роль советских ученых: Шубников, Копцик. Представление об антисимметрии как введение 4-го параметра: цвет, знак, спин. Принцип АхА=К. Примеры двуцветных точечных групп. Вывод черно-белых одномерных групп из 7-ми классических. Вывод двумерных группы и их графики, плоские черно-белые мозаики. Представление о выводе Шубникова на основе примеров из атласа.

9. Двуцветные группы – пример из ромбической сингонии. Графики групп и атлас Шубниковских групп - Копцика. Приложения к магнитным свойствам кристаллов. Многоцветные группы Белова и мозаики, выбор групп. Кристаллоструктурные иллюстрации соединений типа АВ: NaCl, CsCl, CuAu, BN, TlI, ZnS,CaF2.

10. Пятерная симметрия в кристаллографии: точечные группы, фуллерены и трубки, квазикристаллы, узоры Пенроуза как математическая база пятерной симметрии.

11. Понятие о псевдосимметрии как проявление связи группа – надгруппа, роль данного явления в объяснении фазовых переходов и свойств кристаллов. Рассмотрение двух семейств: калий-титанил фосфата (КТР), важнейшего кристалла для нелинейной оптики, и стилвеллитов. Симметрийный закон строения политипных структур, выявление семейств и предсказания структур

12. Выявления моделей структур и корректной симметрии с помощью программных комплексов, анализ результатов применения программ. Принципы создания алгоритмов машинного обучения для предсказания свойств кристаллов. Понятие структурных дескрипторов.