Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

и.о.декана Геологического факультета

чл.-корр. РАН \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_/Н.Н.Ерёмин/

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_20\_\_ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МЕЖФАКУЛЬТЕТСКОГО КУРСА**

**Симметрия кристаллического микромира с применением искусственного интеллекта**

Автор-составитель: Белоконева Е.Л., Марченко Е.И.

**Уровень высшего образования:**

***Бакалавриат /Магистратура***

Форма обучения:

***Очная***

Рабочая программа рассмотрена и одобрена

Учебно-методическим Советом Геологического факультета

(протокол № \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_, \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_)

Москва 2022

**Цель и задачи дисциплины**

**Целью** курса «Симметрия кристаллического микромира с применением искусственного интеллекта» является освоение студентами симметрийныхоснов, управляющих строением кристаллов на атомном уровне,получение базовых представлений об искусственном интеллекте в кристаллохимии для предсказания структур

**Задачи -** изучить использование пространственных групп для описания структур и связи со свойствами, понимать построение групп и владеть Интертаблицами. Знать возможности использования искусственного интеллекта (ИИ) и приемы предсказания структур и свойств.

**Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

В курсе «Симметрия кристаллического микромира с применением искусственного интеллекта» излагаются следующие проблемы:

- операции и элементы симметрии, бесконечные, начиная от самих элементов симметрии микромира через одномерно-бесконечные постройки (бордюры), двумерно-бесконечные (слои) с привлечением графики Эшера до трехмерных Федоровских групп.

- трехмерные Федоровские группы последовательно от ромбических к тетрагональным, кубическим и гексагональным, лекции иллюстрируются моделями структур минералов и кристаллов неорганических соединений из уникальной коллекции кафедры кристаллографии.

- двуцветные Шубниковские группы симметрии кристаллов –учение об антисимметрии, с применением в описании магнитных свойств кристаллов,будут упомянуты многоцветные группы симметрии Белова.

- сопоставление генетических алгоритмов и алгоритмов машинного обучения с классической теорией порядка-беспорядка в контексте предсказания новых структур; обзор современных предсказательных моделей в области кристаллохимии соединений, основанных на применении искусственного интеллекта

**Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП** – относится к вариативной части ОПОП, является дисциплиной по выбору, обязательной для освоения.

**2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:**

базируется на знаниях подисциплинам«Высшая математика», «Основы неорганической химии»

**3. Объем дисциплины (модуля)** составляет 1з.е., в том числе **24** академических часов на контактную работу обучающихся с преподавателем (лекции), 12 академических часов на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации –зачет.

**4. Формат обучениядопускаетэлементы электронного обучения и использования дистанционных образовательных технологий.**

**5.**

**Содержание лекций :**

1.История создания групп, школы Федорова и Шенфлиса, основные представления об элементах симметрии микромира и влияние трансляции,одномерные и двумерные группы и их вывод, роль симметрии слоев в настоящее время, узоры Эшера. Практический анализ картин по симметрии.

2. Решетки Бравэ, ромбические группы, разбор общего условия осей, плоскости, основные характеристики позиций атомов в группе, Интертаблицы и способы описаний структур. Тетрагональные группы-классный метод вывода и тетрагонализация на основе ромбических групп путем завышением симметрии

3. Кубические группы: пример вывода из ромбических, необходимость тетрагональных, особенность графики и изображений структур – первый Атлас с чертежами групп. Примеры базовых структурных типов и модели

4. Гексагональные группы, вывод классным методом и из кубических, базовые структурные типы минералов и неорганических соединений, плотнейшие упаковки. Моноклинные группы и рассмотрение проблемы встречаемости пространственных групп.

5.Антисимметрия, основные положения, точечные, одномерные, двумерные и трехмерные Шубниковские группы, узоры Эшера; знакомство с атласомКопцика, приложения к магнитным группам – новейшие примеры с отсутствием симметрийного анализа

6. Многоцветная симметрия Белова, узоры и точечные группы, магнетизм. Понятия о пятерной симметрии в кристаллографии в применении к новейшим достижениям углеродных материалов.

7. Искусственный интеллект в структурном анализе, программы поиска симметрии и определения структур. Сопоставление GA (генетический алгоритм) и ML (машинное обучение) с OD-теорией, предсказания структур и реализованные случаи боратов, ванадатов, йодатов и др.

8. Искусственный интеллект и машинное обучение в современной парадигме кристаллохимии. Источники информации о структурах – базы данных материалов (springermaterials). Принципы создания алгоритмов машинного обучения для предсказания свойств кристаллов.

9. Понятие структурных дескрипторов. Cпособы представления структурных данных. Классическое представление структурны данных. Представление структурных данных молекул и периодических кристаллических структур в машинно-читаемом виде.

10. Применение метода искусственного интеллекта в задачах химии и кристаллохимии. Возможности и ограничения. Прогнозирование связи кристаллических структур с их физическими свойствами.

11. Как искусственный интеллект помогает расшифровывать кристаллические структуры. Современные алгоритмы машинного обучения для расшифровки кристаллических структур, предсказанию симметрии и позиций атомов по рентгеноструктурным данным.

12. Предсказательные модели в кристаллохимии с применением искусственного интеллекта. Заменят ли человека компьютеры в науках о кристаллах и их свойствах в ближайшем будущем?

**6. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)**

**Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.**

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 зацвечиванияподрешеточных 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 кристаллов
4. Принципы выявления моделей структур и корректной симметрии с помощью программных комплексов.
5. Принципы создания алгоритмов машинного обучения для предсказания свойств кристаллов.
6. Понятие структурных дескрипторов.
7. Предсказательные модели в кристаллохимии с применением искусственного интеллекта
8. Расшифровка кристаллических структур с применением искусственного интеллекта

**Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине (зачет) в формате дистанционного интерактивного зачета**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Оценка результатов обучения, *соответствующие виды оценочных средств* | **Незачет** | **Зачет** |
| **Знания** *(интерактивный опрос)* | Фрагментарные знания или отсутствие знаний при наборе баллов менее 75 | Сформированные систематические знания или общие, но не структурированные знания, балл выше 75 |
| **Умения***(интерактивный опрос)* | Не систематическое умение или отсутствие умений, балл менее 75 | Успешное и систематическое умение или в целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера),балл выше 75 |
| **Навыки (владения, опыт деятельности)** *(интерактивный опрос)* | Недостаток отдельных навыков или отсутствие навыков, балл менее 75 | Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач или, в целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме,балл выше 75 |

**7. Ресурсное обеспечение:**

**А) Перечень основной и дополнительной литературы.**

**- основная литература:в** наличии в библиотеке и кафедральном фонде,

1.Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П. Теория симметрии кристаллов, М. Изд.ГЕОС, 2000, 394 с.

2. Егоров-Тисменко Ю.К., Кристаллография и кристаллохимия, М. Изд. Университет, Книжныйдом, 2005, 587 с.

3.International Tables for X-Ray crystallography, Vol.A,2th rew/ edit.,Dodrecht/Boston/London. 1989

4. InternationalTablesforX-Raycrystallography, Vol.1 Birmingham. 1952

**-дополнительнаялитература:**

**1.Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П.** Геометрическая микрокристаллография. М. : Изд-во МГУ, 1976. 238 с.

**2.Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К.** Руководство к

практическим занятиям по кристаллохимии. М. : Изд-во МГУ, 1983. 167 с.

 **3. Белов Н**.**В., Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К.** Атлас

 пространственных групп кубической системы. М. Наука. 1980. 68 с.

**4. Белов Н.В.** Очерки по структурной кристаллографии и федоровские группы симметрии. М.: Наука. 1986. 278 с.

**5. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П.**  К вопросу о выводе гексагональных групп симметрии// Минерал. Журн. 1991. Т.13. №6,С. 8-14.

**6.Егоров-Тисменко Ю.К.** К выводу тетрагональных федоровских групп симметрии на основе пространственных групп ромбической сингонии// Кристаллография. 1996. Т.41. №5.С.

**7.Чупрунов Е.В., Хохлов. А.Ф., Фаддеев М.А.** Кристаллография. М. : Изд-во физ.-мат. литературы. 2000. 496 с.

8.**Шубников А.В., Копцик В.А**., Симметрия в науке и искусстве. Изд.2е. М. Наука. 1972.339 с.

9. **J.P. Janet, H.J. Kulik**, Machine learning in chemistry. American Chemical Society. 2020.100 p.

10.**M. Vollmar, G. Evans**,Machine learning applications in macromolecular X-ray crystallography. Crystallography reviews. 2021. V. 27/2. Pp. 54-101.

**Б) Переченьпрограммногообеспечения:**

**- лицензионное**

**- нелицензионне и свободного доступа**

**В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем:**

**Г) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»**

**Д) Материально-технического обеспечение:**

Учебная аудитория с мультимедийным проектором

Учебная коллекция моделейкристаллических структур.

**8. Язык преподавания** – русский.

**9. Преподаватель (преподаватели):** Ответственный за курс — Белоконева Е.Л. (проф. каф.)), преподаватели: Белоконева Е.Л., Марченко Е.И.

**10. Разработчики программы:**Белоконева Е.Л., профессор, Марченко Е.И., вед. научн. сотрудник