

Аннотация.

Предлагаемый межфакультетский курс «Симметрия кристаллического микромира с применением алгоритмов машинного обучения» представляет собой изложение фундаментальных симметричных 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 симметричных 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. В рамках курса будет проведено сопоставление генетических алгоритмов и алгоритмов машинного обучения с классической теорией порядка-беспорядка в контексте предсказания новых структур. Слушатели узнают о том, как искусственный интеллект предсказывает новых кристаллические структуры и их свойства, какие у него возможности и ограничения. В рамках курса будет проведен обзор современных предсказательных моделей в области кристаллохимии соединений, основанных на применении искусственного интеллекта.

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 гемиедри для P-решетки Бравэ, примеры вывода групп с C-, A-, 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 гемиедрией. Примеры экзотических групп (*Fddd*). Представление об осевых группах.
10. Классный вывод тетрагональных голоэдрических групп и особенности вычерчивания 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 *m3*. Примеры построения графиков.
13. Принцип вывода кубических пространственных групп на основе тетрагональных. Примеры построения графиков.

14. Класный 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 $AA=K$, возможные двуцветные оси, примеры двуцветных точечных групп и их иллюстрация.
18. Принцип зацветивания подрешеточных элементов симметрии и введение цветной трансляции, одномерные группы антисимметрии.
19. Плоские группы антисимметрии, графики двуцветных групп и Беловские мозаики антисимметрии.
20. Цветные решетки Бравэ и примеры групп ромбической гемиздри, 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
24. Квазикристаллы.
25. Псевдосимметрия в кристаллографии.
26. Возможность предсказания структур с использованием симметричных законов строения кристаллов
27. Принципы выявления моделей структур и корректной симметрии с помощью программных комплексов.
28. Принципы создания алгоритмов машинного обучения для предсказания свойств кристаллов.
29. Понятие структурных дескрипторов.
30. Предсказательные модели в кристаллохимии с применением искусственного интеллекта
31. Расшифровка кристаллических структур с применением искусственного интеллекта

Программа курса

«Симметрия кристаллического микромира с применением алгоритмов машинного обучения»

1. История создания групп, основные представления об элементах симметрии микромира, одномерные и двумерные группы, узоры Эшера.
2. Решетки Бравэ, ромбические группы, основные характеристики позиций атомов, интертаблицы. Тетрагональные группы-классный метод вывода и тетрагонализация
3. Кубические группы: пример вывода из ромбических, особенность графики и изображений структур. Гексагональные группы (начало)
4. Гексагональные группы, продолжение, вывод из кубических, базовые структурные типы и упаковки. Моноклинные группы и встречаемость групп.
5. Антисимметрия, основные положения, точечные, одномерные, двумерные и Шубниковские группы, узоры Эшера и атлас Копчика, приложения к магнитным группам
6. Многоцветная симметрия Белова, узоры и точечные группы, магнетизм. Понятия о пятерной симметрии в кристаллографии.
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 (springer materials). Принципы создания алгоритмов машинного обучения для предсказания свойств кристаллов.
9. Понятие структурных дескрипторов. Способы представления структурных данных.
10. Применение метода искусственного интеллекта в задачах химии и кристаллохимии. Возможности и ограничения.
11. Как искусственный интеллект помогает расшифровывать кристаллические структуры.
12. Предсказательные модели в кристаллохимии с применением искусственного интеллекта. Заменят ли человека компьютеры в науках о кристаллах и их свойствах в ближайшем будущем?