

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ  
Декан геологического факультета  
МГУ имени М.В.Ломоносова  
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«25» сентября 2025г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Наименование дисциплины (модуля):**

**Структурный дизайн новых материалов**

**Уровень высшего образования:  
магистратура**

---

**Направление подготовки/ специальность:**

**05.04.01 Геология**

**Образовательная программа магистратуры ИМ:**

**Кристаллография и кристаллохимия**

**Форма обучения:**

***Очная***

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методическим Советом Геологического факультета  
(протокол № 6 от 8 сентября 2025 г.)

Москва 2025

---

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 05.04.01 Геология, утвержденным приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции)

Год (годы) приема на обучение – 2025.

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

*Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.*

## Цель и задачи дисциплины

**Целью** курса "Структурный дизайн новых материалов" является получение студентами теоретических знаний и практических навыков моделирования периодических твердых тел для выявления взаимосвязи состав-структура-свойство, а также применения полученных знаний для направленного проектирования новых, ещё не синтезированных функциональных материалов теоретическими методами.

### Задачи

1) Изучение теоретических основ современных методов предсказания кристаллических структур с заданными функциональными свойствами.

2) Освоение методов теории функционала электронной плотности для расчетов электронной структуры соединений.

3) Изучение приемов обработки больших объемов данных кристаллографической информации и подходов к направленному поиску кристаллических структур с заданными функциональными свойствами с использованием современных алгоритмов, написанных на языке Python и современных баз данных кристаллических структур и материалов.

4) Знакомство с магнитными материалами, их ключевыми характеристиками и методами теоретического дизайна.

5) Изучение приемов, основанных на топологическом подходе и выявлении взаимосвязей групп симметрии кристаллических структур с использованием формализма Бернигаузена для теоретического дизайна новых материалов.

### Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Современные методы и алгоритмы для теоретического расчета физических свойств соединений и дизайна новых материалов: общая иерархия, принципы работы, достоинства и недостатки. Полуэмпирические методы, *ab initio* методы, эволюционные алгоритмы. Построение различных гетероструктур и поверхностей в программе VESTA и последующий расчет их энергий. Расчет эффективных зарядов на атомах в кристаллических структурах. Иерархия современных *ab initio* методов. Теория функционала электронной плотности (DFT), основные понятия. Современные базы данных материалов, извлечение информации из них. Классификация первых зон Бриллюэна кристаллов с точки зрения симметрии. Симметрия *k*-точек обратного пространства первых зон Бриллюэна. Расчеты с использованием DFT. Работа в программе Quantum Espresso: подготовка структурных файлов к расчетам, расчеты методом самосогласованного поля (SCF), методика расчета зонных структур и плотности электронных состояний. Работа с различными форматами данных для представления структуры молекул. Расчет НОМО-LUMO для различных молекул и органических катионов, визуализация полученных результатов. Взаимосвязи группа-подгруппа в структурных типах, формализм Бернигаузена. Иерархия кристаллических структур с использованием соотношений группа-подгруппа и связь с физическими свойствами соединений.

**1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО** – вариативная часть, профессиональный блок, является дисциплиной по выбору, курс – I, семестр – 1.

### 2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

освоение дисциплин «Кристаллография», «Теория симметрии кристаллов», «Кристаллохимия», «Рабочее пространство кристаллохимика».

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы (показатели) достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), сопряженные с компетенциями
--------------------------------	--	---

<p><b>ОПК-2.М</b> Способен применять на практике знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин, определяющих профиль подготовки при решении задач профессиональной деятельности.</p>	<p><b>М.ОПК-2. И-1.</b> Использует теоретические знания о закономерностях и особенностях геологических процессов для решения профессиональных задач.</p>	<p><b>Знать:</b> роль особенностей состава и структуры минералов и их функциональных свойств в решении проблем синтеза новых природоподобных функциональных материалов с заданными функциональными свойствами.</p>
<p><b>ОПК-3.М</b> Способен самостоятельно формулировать цели исследований, устанавливать последовательность решения профессиональных задач.</p>	<p><b>М.ОПК-3 И-1.</b> Использует стандартные подходы и методы при решении задач профессиональной деятельности. <b>М.ОПК-3. И-2.</b> Владеет навыками получения информации (полевой, камеральной, лабораторной) для решения стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки.</p>	<p><b>Знать:</b> принципы работы с кристаллическими структурами минералов и синтетических соединений в обратном пространстве на примере распространенных структурных типов кристаллов. <b>Уметь:</b> применять теоретические знания в практической работе, уметь использовать современные инструменты, реализованные в различных компьютерных программах для работы со структурными данными в обратном пространстве.</p>
<p><b>СПК-3.М</b> Способность разрабатывать теоретические модели кристаллических структур, прогнозировать поведение химических элементов в природных процессах</p>	<p><b>М.СПК-3. И-1.</b> Владеет методами поиска и анализа информации в области наук геохимического цикла, в том числе – с применением современных информационно-коммуникационных технологий. <b>М.СПК-3. И-2.</b> Владеет навыками систематизации и интерпретации данных в области наук геохимического цикла.</p>	<p><b>Знать:</b> методы работы с базами данных, содержащих кристаллографическую информацию с использованием современных компьютерных программ. <b>Уметь:</b> обрабатывать методами математической статистики большие объемы данных кристаллографической информации о минералах, синтетических соединениях и их свойствах, уметь репрезентативно представлять эти данные в зависимости от целевого свойства кристаллических структур. <b>Владеть:</b> навыками описания кристаллических структур, обработки структурной кристаллографической информации с использованием для этого современных компьютерных программ.</p>

**4. Объем дисциплины:** 2 з.е., в том числе 24 академических часов на контактную работу обучающихся с преподавателем, 48 академических часов на самостоятельную работу обучающихся, форма промежуточной аттестации – зачет.

5. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий:

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося (выполнение практических работ), часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) <i>Виды контактной работы, часы<sup>1</sup></i>			Всего	
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Практические/лабораторные занятия		
Раздел 1. Введение. Исторический экскурс подходов к исследованию материалов и веществ. Самые исследуемые на сегодняшний день классы материалов и основы их структурного дизайна, классические подходы		2				домашняя работа, 6
Раздел 2. Методы компьютерного дизайна материалов: иерархия, возможности, принципы работы, примеры различных работ		2				домашняя работа, 6
Раздел 3. Зонная структура кристалла. Расчёт зонной структуры кристаллов и плотности электронных состояний. (Quantum Espresso, BURAI)				6		домашняя работа, 6
Раздел 4. Построение дерева взаимоотношений группа-подгруппа. Пример на семействе структур, производных от структурного типа $\text{ReO}_3$ (Vesta, Quantum		2		4		домашняя работа, 6

<sup>1</sup> Текущий контроль успеваемости может быть реализован в рамках занятий семинарского типа, групповых консультаций или индивидуальной работы с обучающимися

Espresso)						
Раздел 5. Расчеты НОМО-LUMO для молекул с использованием инструментов на алгоритмическом языке Python				4		домашняя работа, 12
Раздел 6. Дизайн материалов, связь структуры и свойств		4				Реферат, 8
Итоговая аттестация <u>зачет</u> <sup>2</sup>						
<b>Итого</b>	72			<b>28</b>		44

<sup>2</sup> *Время для подготовки к промежуточной аттестации в форме **зачета** выделяется из часов самостоятельной работы обучающихся. Промежуточная аттестация в форме **экзамена** проводится во время экзаменационной сессии, предусмотренной графиком учебного процесса.*

## **Содержание разделов дисциплины:**

### **Раздел 1. Исторический экскурс подходов к исследованию материалов и веществ.**

Самые исследуемые на сегодняшний день классы материалов и основы их структурного дизайна, классические подходы. Базы данных кристаллических структур. Локальные репозитории для хранения кристаллографической информации. Представление кристаллических структур в машиночитаемом виде. Кристаллические графы.

### **Раздел 2. Современные методы и алгоритмы для теоретического расчета физических свойств соединений и дизайна новых материалов.**

Общая иерархия методов и алгоритмов, принципы работы, достоинства и недостатки. Полуэмпирические методы, *ab initio* методы, эволюционные алгоритмы. Работа с различными форматами данных для представления структуры молекул. Расчет HOMO-LUMO для различных молекул и органических катионов, визуализация полученных результатов. Написание собственного алгоритма на языке Python с использованием набора стандартных библиотек для оптимизации геометрии молекул и расчета HOMO-LUMO.

### **Раздел 3. Методы *ab initio* расчетов физических свойств кристаллов.**

Иерархия современных *ab initio* методов. Теория функционала электронной плотности, основные понятия. Обзор программных пакетов для DFT расчетов, их возможности и недостатки. Современные базы данных материалов, извлечение информации из них.

Расчеты с использованием DFT. Работа в программе Quantum Espresso: подготовка структурных файлов к расчетам, расчеты методом самосогласованного поля (SCF), методика расчета зонных структур и плотности электронных состояний. Расчет зонных структур Si, Ge и Fe. Расчет зонных структур графита, нитрида бора, графена и других слоистых соединений. Создание многослойных структур с различным сдвигом слоев друг относительно друга и расчет и сравнение их зонных структур.

### **Раздел 4. Симметрия *k*-точек обратного пространства первых зон Бриллюэна.**

Наиболее распространенные структурные типы кристаллов и подходы к их описанию с использованием решёток Браве. Обратное пространство. Классификация первых зон Бриллюэна кристаллов с точки зрения симметрии (Делоне решёток) и их связь с решётками Браве. Связь симметрии кристаллической структуры с симметрией зоны Бриллюэна и физическими свойствами кристалла.

Различный выбор пути по *k*-точкам обратного пространства первой зоны Бриллюэна. Взаимосвязь структуры и симметрии кристаллов с электронными свойствами на примере слоистых структур - графита и нитрида бора (расчеты в программе Quantum Espresso).

### **Раздел 5. Взаимосвязи группа-подгруппа в структурных типах, формализм Бернигаузена.**

Иерархия кристаллических структур с использованием соотношений группа-подгруппа и связь с физическими свойствами соединений. Принципы классификации структур с использованием теории групп, примеры. Классификация кристаллических структур с использованием формализма Бернигаузена (построение взаимосвязей группа-подгруппа), расчет зонных структур для этих соединений и выявление закономерностей состав-кристаллическая структура-зонная структура материала на примере гибридных перовскитоподобных соединений с различной размерностью неорганической подструктуры.

### **Раздел 6. Дизайн материалов, связь структуры и свойств.**

Применение методов машинного обучения для дизайна новых материалов. Построение предсказательных моделей для прогнозирования физико-химических свойств неорганических материалов с помощью написания алгоритма на языке Python. Предсказание ширины запрещенной зоны полупроводников. Построение предсказательных моделей для прогно-

зирования физико-химических свойств неорганических материалов с помощью написания алгоритма на языке Python. Работа с кристаллографическими данными.

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

### **6.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.**

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных практических (расчетных работ) и рефератов.

Для текущего контроля студентов в ходе семестра осуществляется контроль за выполнением домашних работ.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине применяется для всех типов и этапов контроля

#### ***Расчетные домашние задания:***

Расчёт зонной структуры и плотности электронных состояний Ge, Sn.

Расчёт зонной структуры и плотности электронных состояний Ge, Sn.

Расчёт зонной структуры и плотности электронных состояний для двумерных материалов.

Определение симметрии k-точек первой зоны Бриллюэна обратного пространства.

Построение взаимоотношений группа-подгруппа на примере семейства структур гибридных перовскитоподобных соединений.

Дизайн новых кристаллических структур гибридных материалов с применением теории плотнейших упаковок с топологически разным заполнением октаэдрических пустот.

Предсказание ширины запрещенной зоны оксидов с использованием базы данных материалов и алгоритмов на языке Python.

Предсказание модуля упругости оксидов с использованием базы данных материалов и алгоритмов на языке Python.

#### ***Рефераты:***

Современные открытия в области магнитных материалов.

Связь кристаллической структуры с магнитными свойствами.

Теоретический структурный дизайн современных магнитных материалов.

Природоподобные магнитные материалы.

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

#### ***Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:***

1. Самые исследуемые на сегодняшний день классы материалов и основы их структурного дизайна, классические подходы.
2. Базы данных кристаллических структур.
3. Локальные репозитории для хранения кристаллографической информации.
4. Представление кристаллических структур в машиночитаемом виде. Кристаллический графы.
5. Общая иерархия методов и алгоритмов, принципы работы, достоинства и недостатки. Полуэмпирические методы, *ab initio* методы, эволюционные алгоритмы.
6. Расчет НОМО-LUMO для различных молекул и органических катионов, визуализация полученных результатов.

7. Иерархия современных *ab initio* методов. Теория функционала электронной плотности, основные понятия. Обзор программных пакетов для DFT расчетов, их возможности и недостатки.
8. . Теория функционала электронной плотности, основные понятия. Обзор программных пакетов для DFT расчетов, их возможности и недостатки.
9. Наиболее распространенные структурные типы кристаллов и подходы к их описанию с использованием решёток Браве.
10. Обратное пространство. Классификация первых зон Бриллюэна кристаллов с точки зрения симметрии (Делоне решёток) и их связь с решётками Браве. Связь симметрии кристаллической структуры с симметрией зоны Бриллюэна и физическими свойствами кристалла.
11. Различный выбор пути по k-точкам обратного пространства первой зоны Бриллюэна. Взаимосвязь структуры и симметрии кристаллов с электронными свойствами.
12. Иерархия кристаллических структур с использованием соотношений группа-подгруппа и связь с физическими свойствами соединений.
13. Принципы классификации структур с использованием теории групп, примеры.
14. Классификация кристаллических структур с использованием формализма Бернигаузена (построение взаимосвязей группа-подгруппа), расчет зонных структур для этих соединений и выявление закономерностей состав-кристаллическая структура-зонная структура материала на примере гибридных перовскитоподобных соединений с различной размерностью неорганической подструктуры.
15. Применение методов машинного обучения для дизайна новых материалов.
16. Построение предсказательных моделей для прогнозирования физико-химических свойств неорганических материалов с помощью написания алгоритма на языке Python.
17. Предсказание ширины запрещенной зоны полупроводников. Построение предсказательных моделей для прогнозирования физико-химических свойств неорганических материалов с помощью написания алгоритма на языке Python.

### Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: Теории функционала электронной плотности, различных приближений этого метода для моделирования свойств кристаллических структур периодических твердых тел. Взаимосвязей состав-структура-свойства в магнитных материалах.	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания, основанные на понимании методов расчетов, использующихся в теории функционала электронной плотности
Умения: Выполнить расчет электронной плотности для кристаллической структуры. Выявлять взаимосвязи состава-структуры-	Умения отсутствуют	Не систематическое умение, допускает неточно-	В целом успешное, но содержащее пробелы умение.	Успешное умение расчета электронной плотности в кристаллических структурах,

свойства материалов.		сти не-принципиального характера		выявлять взаимосвязи состав-структура-свойство на основании данных об электронной плотности.
Владения: методами обработки экспериментальных и теоретических структурных данных, работы с базами данных кристаллических структур и большими объемами кристаллографической информации, статистический анализ свойств материалов	Навыки отсутствуют	Фрагментарное владение отдельными навыками	В целом сформированные навыки.	Владение методами обработки структурной информации, больших баз данных, статистическим анализом свойств материалов

## 7. Ресурсное обеспечение:

### Перечень основной и дополнительной литературы.

#### - основная литература:

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

Белов Н.В. Структуры ионных кристаллов и металлических фаз. М.-Л.: Изд-во АН СССР. 1947. 237 с.

Бокий Г.Б. Кристаллохимия. 3е изд. М.: Изд-во Наука. 1971. 400 с.

Современная кристаллография. Т.1. М.; Наука. 1979. 283 с.

#### - дополнительная литература:

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

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

- Перечень лицензионного программного обеспечения: пакеты программ: Microsoft Office PowerPoint, Quantum Espresso, Vesta, Python, Anaconda, Jupyter Notebook
- Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем: ICSD, COD, Materials project.
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»: <https://www.crystallography.net/cod/>, <https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/>, <https://next-gen.materialsproject.org/>.
- Описание материально-технической базы
  - а) Лекционные аудитории с проектором и экраном.
  - б) Компьютерный класс на 10 мест, оборудованный компьютерами под управлением ОС Windows-10 и выше.

### 8. Язык преподавания – русский.

9. Преподаватель: доц., к.х.н. Марченко Е.И.

10. Разработчик программы: доц., к.х.н. Марченко Е.И.