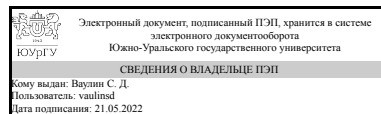


УТВЕРЖДАЮ
Директор института
Политехнический институт



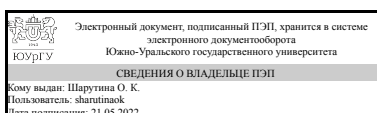
С. Д. Ваулин

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
научных исследований
к ОП ВО от 01.07.2020 №084-2087

Научно-исследовательская деятельность
для направления 22.06.01 Технологии материалов
Уровень подготовка кадров высшей квалификации
направленность программы Нанотехнологии и наноматериалы (по отраслям)
(05.16.08)
форма обучения очная
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

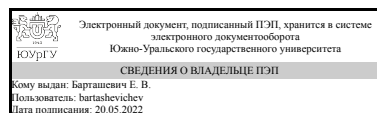
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 22.06.01 Технологии материалов, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 888

Зав.кафедрой разработчика,
д.хим.н., проф.



О. К. Шарутина

Разработчик программы,
д.хим.н., доц., профессор



Е. В. Барташевич

1. Общая характеристика

Форма проведения

Непрерывно

Цель научных исследований

Определение объектов исследования и всестороннее, достоверное изучение их структуры, характеристик, свойств связей на основе разработанных в науке принципов и методов познания, а также получение полезных для деятельности человека результатов.

Задачи научных исследований

Использование общих и специальных методов научного познания. Освоение методов компьютерного эксперимента в химии, физике, материаловедении. Проведение научных исследований в соответствии с индивидуальным заданием.

Краткое содержание научных исследований

Изучение информации в базах данных по выбранным объектам исследований. Выполнение компьютерного эксперимента: разработка структурных моделей разного уровня, валидация моделей.

Квантово-химические расчеты с использованием методов теории функционала плотности, методов теории возмущений, методы учета релятивистских эффектов, учета периодических граничных условий в моделировании поверхностей, кристаллов, полимеров.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате выполнения научных исследований

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения при прохождении практики (ЗУНы)
ОПК-5 способностью и готовностью использовать на практике интегрированные знания естественнонаучных, общих профессионально-ориентирующих и специальных дисциплин для понимания проблем развития материаловедения, умение выдвигать и реализовывать на практике новые высокоэффективные технологии	Знать: актуальные проблемы и тенденции развития компьютерного материаловедения; существующие междисциплинарные взаимосвязи и возможности использования инструментария моделирования атомно-молекулярных систем при проведении исследований на стыке наук; способы, методы и формы ведения научной дискуссии, основы эффективного научно-профессионального общения
	Уметь: выработать свою точку зрения в вопросах выбора методов моделирования, следовать выбранным методологическим и методическим подходам, дорабатывать

	структурные модели с учетом результатов их обсуждения
	Владеть: Навыками проведения анализа научной и практической значимости проводимых исследований, а также технико-экономической эффективности разработки

3. Место научных исследований в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Научно-исследовательская деятельность (3 семестр)

Требования к «входным» знаниям, умениям, навыкам аспиранта, необходимым для выполнения научных исследований и приобретенным в результате освоения предшествующих дисциплин:

Дисциплина	Требования
Научно-исследовательская деятельность (1 семестр)	Использовать найденные литературные данные и уметь внедрять основы компьютерной техники и информационных технологий в научно-исследовательскую деятельность.

4. Время проведения

Время проведения научных исследований (номер уч. недели в соответствии с графиком) с 23 по 42

5. Этапы и объем научных исследований

Общая трудоемкость составляет зачетных единиц 21, часов 756, недель 14.

№ раздела (этапа)	Наименование разделов (этапов)	Кол-во часов	Форма текущего контроля
1	Планирование компьютерного эксперимента и выбор методов моделирования материалов и наноматериалов	400	Устная беседа с научным руководителем
2	Отработка методик проведения экспериментальных исследований.	356	Устная беседа с научным руководителем

6. Содержание научных исследований

№ раздела	Наименование или краткое содержание вида работ	Кол-во часов
-----------	--	--------------

(этапа)		
1	<p>Определение и постановка проблемы исследования, планирование, подготовка и проведение пробного исследования; обработка данных и анализ результатов; а также выполнения информационного поиска по теме диссертационного исследования. Объект и предмет исследования. Определение главной цели. Определение задач исследования в соответствии с поставленными целями. Построение дерева целей и задач для определения необходимых требований и ограничений: временных, материальных, энергетических, информационных и др.</p>	400
2	<p>Критерии оценки эффективности исследуемого объекта, методологии, процесса, устройства. Параметры, контролируемые при исследованиях. Оборудование, экспериментальные установки, приборы, аппаратура, оснастка. Условия и порядок проведения опытов. Состав опытов. Математическое планирование экспериментов. Обработка результатов исследований и их анализ. Проведение теоретических и экспериментальных исследований. Этапы проведения эксперимента. Методы познания: сравнения, анализ, синтез, абстрагирование, аналогия, обобщение, системный подход, моделирование. Методы теоретического исследования: формализация, аксиоматический метод, объективная гипотеза в компьютерном эксперименте.</p>	356

7. Формы отчетности

Аспирант предоставляет на проверку отчет с результатами измерений, расчетов оформленных в виде таблиц, графиков, схем, структурных моделей.

8. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Форма итогового контроля – зачет.

8.1. Паспорт фонда оценочных средств

Наименование разделов	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Вид контроля
Все разделы	ОПК-5 способностью и готовностью использовать на практике интегрированные знания естественнонаучных, общих профессионально-ориентирующих и специальных дисциплин для понимания проблем развития материаловедения, умение выдвигать и реализовывать на практике новые высокоэффективные технологии	Текущий контроль
Все разделы	ОПК-5 способностью и готовностью использовать на практике интегрированные знания естественнонаучных, общих профессионально-ориентирующих и специальных дисциплин для понимания проблем развития материаловедения, умение выдвигать и	Зачет

	реализовывать на практике новые высокоэффективные технологии	
--	--	--

8.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
Текущий контроль	Беседа с научным руководителем на которой ведется обсуждение выбора методов моделирования, обсуждение достоверности результатов, полученных выбранным методом	зачтено: Получены достоверные результаты с использованием более чем одного метода не зачтено: Отсутствие результатов либо результаты недостоверные
Зачет	Аспирант сдает на проверку Отчет с таблицами и графиками, отражающими полученные результаты	зачтено: Отчет содержит информативные таблицы данных, рисунки правильно иллюстрируют полученные результаты не зачтено: Отсутствие отчета или отсутствие в отчете таблиц с полученными данными

8.3. Примерная тематика научных исследований

Методы теории функционала плотности и теории возмущений в изучении концепции нековалентных связей

Приближение циклического кластера в моделировании структуры молекулярных кристаллов

Периодические граничные условия в моделировании поверхностей и границ раздела фаз.

9. Учебно-методическое и информационное обеспечение

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Цирельсон, В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Текст] учеб. пособие для вузов по химико-технол. направлениям и специальностям В. Г. Цирельсон. - 3-е изд., испр. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 495 с. ил., [12] л. цв. ил.; табл.

2. Барташевич, Е. В. Структурная организация и количественные дескрипторы физико-химических свойств соединений с галогенными связями по данным о распределении электронной плотности [Текст] автореф. дис. ... д-ра хим. наук : специальность 02.00.04 - Физическая химия Е. В. Барташевич ; науч. консультант В. Г. Цирельсон ; Юж-Урал. гос. ун-т. - Челябинск, 2015. - 30, [1] с. ил. электрон. версия

б) дополнительная литература:

1. Додель, Р. Локализация и делокализация в квантовой химии : Атомы и молекулы в основном состоянии Р. Додель ; ред. Шальве О. и др.; пер. с англ.: Е. В. Борисова ; под ред. Г. М. Жидомирова. - М.: Мир, 1978. - 411 с. ил.
2. Бейдер, Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория Учеб. Р. Бейдер; Пер. с англ. Е. С. Апостоловой и др.; Под ред. М. Ю. Антипина, В. Г. Цирельсона. - М.: Мир, 2001. - 532 с.

из них методические указания для самостоятельной работы студента:

1. Райзберг, Б. А. Практическое руководство по написанию и защите диссертаций [Текст] Б. А. Райзберг. - М.: Экономистъ, 2008. - 142 с. 20 см.

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Каныгина, О. Н. Вычислительные методы в химии : учебное пособие / О. Н. Каныгина. — Оренбург : ОГУ, 2019. — 99 с. — ISBN 978-5-7410-2274-0. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/159947 (дата обращения: 04.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Котомин, А. А. Эмпирические методы расчета взрывчатых веществ и композиций : монография / А. А. Котомин, С. А. Душенок, А. С. Козлов. — 2-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 384 с. — ISBN 978-5-8114-6985-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: https://e.lanbook.com/book/153912 (дата обращения: 04.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

10. Информационные технологии, используемые при выполнении научных исследований

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Office(бессрочно)
2. -Firefly(бессрочно)
3. BlueSnap-Chemcraft(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

1. -Thr Cambridge Crystallographic Data Centre(бессрочно)
2. -База данных ВИНТИ РАН(бессрочно)

11. Материально-техническое обеспечение

Место выполнения научных исследований	Адрес	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение
НИИ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов ЮУрГУ	454080, Челябинск, Ленина, 76	Компьютер, принтер, сканер.