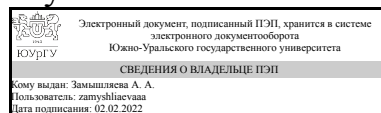


УТВЕРЖДАЮ  
Директор института  
Институт естественных и точных  
наук



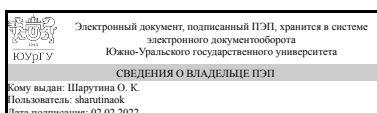
А. А. Замышляева

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
научных исследований  
к ОП ВО от 01.07.2020 №084-2352**

Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук  
для направления 04.06.01 Химические науки  
Уровень подготовка кадров высшей квалификации  
направленность программы Физическая химия (02.00.04)  
форма обучения очная  
кафедра-разработчик Теоретическая и прикладная химия

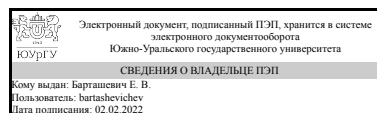
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, утверждённым приказом Минобрнауки от 29.07.2014 № 869

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

Теоретическое и экспериментальное описание объектов исследования и всестороннее, достоверное изучение их структуры, характеристик, свойств связей на основе разработанных и имеющихся в арсенале методов, а также получение и оформление результатов.

## Задачи научных исследований

1. Реализация этапа подготовки и написания кандидатской диссертации.
2. Соблюдение требований к кандидатской диссертации
3. Приращение уровня научной квалификации, личной компетенции и конкурентоспособности в области моделирования структуры и изучения физико-химических свойств.

## 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. Методы статистической обработки результатов. Математические модели, достоверность, адекватность, значимость.

Выработка навыков по формулированию и написанию актуальности, научной новизны, научных положений, практической значимости, достоверности результатов.

Развитие практических умений планирования времени при подготовке диссертации.

## 2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате выполнения научных исследований

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения при прохождении практики (ЗУНы)
ПК-3.4 способностью к использованию современных методов для установления строения вещества	Знать: Методы экспериментального определения структуры химических соединений, методы компьютерного моделирования структуры атомно-молекулярных систем.
	Уметь: Выбирать функционалы, базисные наборы, силовые поля и другие приближения и поправки для моделирования структуры атомно-

	молекулярных систем Владеть: Навыками запуска компьютерных программ, формированием скриптов, получением выходных данных и анализом.
УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	Знать: Методы исследования и проведения экспериментальных работ; методы анализа и обработки экспериментальных данных; физические и математические модели процессов и явлений, относящихся к исследуемому объекту; Методы поиска литературных источников по разрабатываемой теме с целью их использования при выполнении диссертации.
	Уметь: Формулировать цели и задачи научного исследования; самостоятельно осуществлять выбор и давать обоснования методики исследования;
	Владеть: Навыками анализа, систематизации и обобщения научно-технической информации по теме исследований. 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
Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (5 семестр)	Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (7 семестр)

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

Дисциплина	Требования
Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата наук (5 семестр)	Вести подбор методов моделирования в соответствии с современным опытом и лучшими практиками мирового уровня для выбранных объектов исследования.

#### 4. Время проведения

Время проведения научных исследований (номер уч. недели в соответствии с графиком) с 23 по 43

#### 5. Этапы и объем научных исследований

Общая трудоемкость составляет зачетных единиц 27, часов 972, недель 18.

№ раздела (этапа)	Наименование разделов (этапов)	Кол-во часов	Форма текущего контроля
1	Обобщение результатов компьютерного эксперимента и корректировка структурных моделей	250	Устная беседа с научным руководителем
4	Написание главы диссертации "Экспериментальная часть"	222	Зачет в форме беседы по написанной главе диссертации "Экспериментальная часть"
3	На стыке наук: физика, химия, математика - обработка экспериментальных данных, анализ теоретических моделей.	250	Устная беседа с научным руководителем
2	Отработка методик проведения экспериментальных исследований по изучению физико-химических свойств новых соединений.	250	Устная беседа с научным руководителем

#### 6. Содержание научных исследований

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ	Кол-во часов
2	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.	250
1	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.	250

	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.	
3	Работа со способами обработки экспериментальных данных и данных компьютерного эксперимента. Графический способ. Аналитический способ. Статистическая обработка результатов измерений. Работа с информацией: поисковые атрибуты, результативность поиска, подбор информации по выбранной теме диссертации из библиографических и полнотекстовых баз данных.	250
4	Написание главы диссертации "Экспериментальная часть". Оформление записей о содержании методов, методик и походов, реализованных в диссертационной работе.	222

## 7. Формы отчетности

В конце семестра аспирант предоставляет на проверку написанную главу диссертации "Экспериментальная часть" с оформленными методами, методиками, использованными им в работе.

В ходе выполнения подготовки научно-квалификационной работы аспирант еженедельно обсуждает с научным руководителем текущие задачи.

## 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	УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	зачет
Все разделы	ПК-3.4 способностью к использованию современных методов для установления строения вещества	зачет
Все разделы	УК-2 способностью проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	текущий
Все разделы	ПК-3.4 способностью к использованию современных методов для установления строения вещества	текущий

## 8.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
зачет	Аспирант предоставляет на проверку главу диссертации "Экспериментальная часть"	зачтено: Глава "Экспериментальная часть" написана, учитывается правильный выбор метода расчетов не зачтено: Глава "Экспериментальная часть" не написана или не выбраны необходимые методы.
текущий	Беседа с научным руководителем в ходе которой обсуждаются методы и методики компьютерного эксперимента. Аспиранту предлагается применить несколько разных методов на выбор или подобрать методику для получения необходимой информации.	1: Правильно выбраны методы и объекты моделирования 0: Методы и объекты моделирования не соответствуют поставленным задачам

## 8.3. Примерная тематика научных исследований

Халькогенные связи в молекулярных кристаллах теллурсодержащих соединений.  
Концепции халькогенных связей в молекулярных кристаллах серусодержащих соединений.

Халькогенные связи в молекулярных кристаллах селенсодержащих соединений.

## 9. Учебно-методическое и информационное обеспечение

### Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

1. Кузнецов, И. Н. Диссертационные работы: Методика подготовки и оформления Учеб.-метод. пособие И. Н. Кузнецов. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Дашков и К, 2006. - 448, [1] с.

2. Резник, С. Д. Основы диссертационного менеджмента [Текст] учебник для вузов по экон. и упр. направлениям (38.04.01, 38.04.02, 38.06.01) магистратуры и аспирантуры С. Д. Резник. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: ИНФРА-М, 2016. - 287, [1] с.

3. Резник, С. Д. Основы личной конкурентноспособности [Текст] учеб. пособие для вузов по экон. и управлен. специальностям С. Д. Резник, А. А. Соколова ; под общ. ред. С. Д. Резника. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: ИНФРА-М, 2012. - 250, [1] с.

4. Резник, С. Д. Научное руководство аспирантами [Текст] практ. пособие для вузов С. Д. Резник. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: ИНФРА-М, 2014. - 475, [1] с.

*б) дополнительная литература:*

1. Райзберг, Б. А. Диссертация и ученая степень. Новые положения о защите и диссертационных советах с авторскими комментариями : пособие для соискателей [Текст] Б. А. Райзберг. - 11-е изд., доп. и перераб. - М.: ИНФРА-М, 2012. - 251, [1] с. табл.
2. Райзберг, Б. А. Практическое руководство по написанию и защите диссертаций [Текст] Б. А. Райзберг. - М.: Экономистъ, 2008. - 142 с. 20 см.

*из них методические указания для самостоятельной работы студента:*

1. Брагина Н.А., Кириллова Ю.Г., Лютик А.И., Миронов А.Ф., Швец В.И. - ОРГАНИЗАЦИЯ И МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ОБУЧЕНИЯ АСПИРАНТОВ ПО СПЕЦИАЛЬНОСТЯМ «БИООРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ» И «БИОТЕХНОЛОГИЯ» Тонкие химические технологии - 2009г. №6

### Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование ресурса в электронной форме	Библиографическое описание
1	Основная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Кручинин, Н. Ю. Метод молекулярной динамики при изучении структуры и конформационной динамики макромолекул на поверхностях твердых адсорбентов и в нанокластерах : учебное пособие / Н. Ю. Кручинин. — Оренбург : ОГУ, 2015. — 107 с. — ISBN 978-5-7410-1241-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/98079">https://e.lanbook.com/book/98079</a> (дата обращения: 05.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2	Дополнительная литература	Электронно-библиотечная система издательства Лань	Камышов, В. М. Строение и состояния вещества : учебное пособие для спо / В. М. Камышов, Е. Г. Мирошникова, В. П. Татауров. — Санкт-Петербург : Лань, 2021. — 236 с. — ISBN 978-5-8114-6453-1. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/148010">https://e.lanbook.com/book/148010</a> (дата обращения: 05.01.2022). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

### 10. Информационные технологии, используемые при выполнении научных исследований

Перечень используемого программного обеспечения:

1. Microsoft-Office(бессрочно)
2. -LibreOffice(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

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