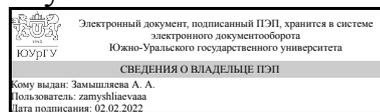


# ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ  
Директор института  
Институт естественных и точных  
наук



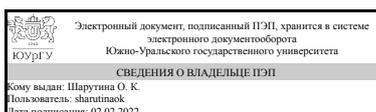
А. А. Замышляева

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

Научно-исследовательская деятельность  
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

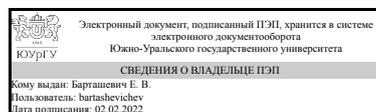
Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки, утверждённым приказом Минобрнауки от 29.07.2014 № 869

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

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.

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.

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

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

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения при прохождении практики (ЗУНы)
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

	<p>обоснования методики исследования;</p> <p>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.</p>
ОПК-2 готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	<p>Знать: актуальные проблемы и тенденции развития компьютерной химии; 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</p>
	<p>Уметь: вырабатывать свою точку зрения в вопросах выбора методов моделирования, следовать выбранным методологическим и методическим подходам, дорабатывать структурные модели с учетом результатов их обсуждения</p>
	<p>Владеть: навыками работы в междисциплинарной команде химиков-синтетиков и химиков-аналитиков</p>

### 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 АМС	400	Устная беседа с научным руководителем
2	Отработка методик проведения экспериментальных исследований.	356	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.	356
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. 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.	400

#### 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-2 готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	зачет
Отработка методик проведения экспериментальных исследований.	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 контроль
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
Планирование компьютерного эксперимента и выбор методов моделирования АМС	ОПК-2 готовностью организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук	текущий контроль

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

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
зачет	Аспирант сдает на проверку Отчета с таблицами и рисунками полученных данных	зачтено: Отчет содержит информативные таблицы данных, рисунки правильно иллюстрируют полученные результаты не зачтено: Отсутствие отчета или отсутствие в отчете таблиц с полученными данными.
текущий контроль	Беседа с научным руководителем на которой ведется обсуждение выбора методов моделирования, обсуждение достоверности результатов, полученных	1: Получены достоверные результаты с использованием более чем одного метода 0: Отсутствие результатов либо

### 8.3. Примерная тематика научных исследований

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

Приближение циклического кластера в моделировании структуры молекулярных кристаллов

## 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	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 :

		издательства Лань	электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/159947">https://e.lanbook.com/book/159947</a> (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: <a href="https://e.lanbook.com/book/153912">https://e.lanbook.com/book/153912</a> (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 Cristallographic 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
НИЛ Многомасштабного моделирования многокомпонентных функциональных материалов ЮУрГУ	454080, Челябинск, Ленина, 76	Компьютер, принтер, сканер.