

ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ
Директор института
Институт естественных и точных
наук

_____ А. В. Келлер
31.08.2017

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
научных исследований
к ОП ВО от 28.06.2017 №007-03-0012

Уровень аспирант
направленность программы Физика конденсированного состояния (01.04.07)
форма обучения очная
кафедра-разработчик Компьютерное моделирование и нанотехнологии

Рабочая программа составлена в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия, утверждённым приказом Минобрнауки от 30.07.2014 № 867

Зав.кафедрой разработчика,
д.физ-мат.н., доц.
(ученая степень, ученое звание)

_____ 30.08.2017
(подпись)

В. П. Бескачко

Разработчик программы,
д.физ-мат.н., профессор
(ученая степень, ученое звание,
должность)

_____ 30.08.2017
(подпись)

А. Г. Воронцов

1. Общая характеристика

Форма проведения

Дискретная

Цель научных исследований

Знакомство с методикой компьютерного эксперимента

Задачи научных исследований

Уточнение задачи исследования.

Получение пробных и тестовых результатов.

Оценка полученной точности.

Краткое содержание научных исследований

Выполнение пробных вычислений, оценка точности, уточнение методики работы.

2. Компетенции обучающегося, формируемые в результате выполнения научных исследований

Планируемые результаты освоения ОП ВО (компетенции)	Планируемые результаты обучения при прохождении практики (ЗУНы)
ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	Знать: основные методики моделирования структуры и свойств материалов на атомном уровне
	Уметь: проводить расчет электронной и атомной структуры материалов
	Владеть: методами оценки точности полученных результатов
ОПК-1 способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	Знать: методику получения новых научных результатов
	Уметь: получать научные результаты, оценивать их точность, делать выводы
	Владеть: методами машинного моделирования

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)	умение проводить расчеты с использованием распределенных вычислительных ресурсов и обрабатывать полученную информацию

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	Уточнение задачи исследования	400	отчет
2	Проведение тестовых расчетов	356	отчет

6. Содержание научных исследований

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ	Кол-во часов
1.1	Проведение пробных расчетов	200
1.2	Уточнение методики	200
2.1	Проведение тестовых расчетов	180
2.2	Оценка точности	176

7. Формы отчетности

Печатный отчет, доклад на защите

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
Уточнение задачи исследования	ОПК-1 способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и	зачет

	информационно-коммуникационных технологий	
Проведение тестовых расчетов	ПК-2.1 умением проводить теоретическое и экспериментальное исследование природы кристаллических и аморфных, неорганических и органических веществ в твердом и жидком состояниях и изменение их физических свойств при различных внешних воздействиях	зачет

8.2. Виды контроля, процедуры проведения, критерии оценивания

Вид контроля	Процедуры проведения и оценивания	Критерии оценивания
зачет	Представление печатного отчета, доклад 10 - 15 минут и публичная защита	зачтено: выполнен план работ, оформлен отчет, проведен доклад по материалам отчета не зачтено: не выполнен план работ, не выполнены тестовые расчеты

8.3. Примерная тематика научных исследований

Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной модели ОЦК-железа

Изменение электронной структуры α -железа, содержащего внедренные атомы водорода

Взаимодействие углеродных нанотрубок (7, 7) и (8, 8) с внедренными атомами

Квантово-химическое моделирование процессов деформации хиральных углеродных нанотрубок

Электрические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7, 7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se

Структура и механические свойства фторированных углеродных нанотрубок

Механические свойства однослойных углеродных нанотрубок

Изменения микрорельефа поверхности мишени при воздействии интенсивных потоков плазмы

9. Учебно-методическое и информационное обеспечение

Печатная учебно-методическая документация

а) основная литература:

Не предусмотрена

б) дополнительная литература:

Не предусмотрена

из них методические указания для самостоятельной работы студента:

1. Созыкин, С. А. Физика наноразмерных систем: учебное пособие / С.А. Созыкин, А.Н. Соболев. –Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. Ч. 1. –113с.

2. Созыкин, С. А. Физика наноразмерных систем: учебное пособие / С.А. Созыкин, А.Н. Соболев. –Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2016. Ч. 1. –113с

Электронная учебно-методическая документация

№	Вид литературы	Наименование разработки	Наименование ресурса в электронной форме	Доступность (сеть Интернет / локальная сеть; авторизованный / свободный доступ)
1	Основная литература	Абрикосов, А.А. Основы теории металлов. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2010. — 600 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/2093 — Загл. с экрана.	Электронно-библиотечная система Издательства Лань	Интернет / Авторизованный
2	Дополнительная литература	Ансельм, А.И. Введение в теорию полупроводников. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — СПб. : Лань, 2016. — 624 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/71742 — Загл. с экрана.	Электронно-библиотечная система Издательства Лань	Интернет / Авторизованный
3	Дополнительная литература	Бланк, В.Д. Фазовые превращения в твердых телах при высоком давлении. [Электронный ресурс] / В.Д. Бланк, Э.И. Эстрин. — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2011. — 412 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/48289 — Загл. с экрана.	Электронно-библиотечная система Издательства Лань	Интернет / Авторизованный
4	Основная литература	Гантмахер, В.Ф. Электроны в неупорядоченных средах. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2013. — 288 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/91178 — Загл. с экрана.	Электронно-библиотечная система Издательства Лань	Интернет / Авторизованный
5	Основная литература	Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2009. — 416 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/2173 — Загл. с экрана.	Электронно-библиотечная система Издательства Лань	Интернет / Авторизованный
6	Дополнительная литература	Чувильдеев, В.Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — М. : Физматлит, 2004. — 304 с. — Режим доступа: http://e.lanbook.com/book/59342 — Загл. с	Электронно-библиотечная система Издательства Лань	Интернет / Авторизованный

	экрана.		
--	---------	--	--

10. Информационные технологии, используемые при выполнении научных исследований

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -SIESTA(бессрочно)
2. -Wien2k(бессрочно)
3. -Python(бессрочно)

Перечень используемых информационных справочных систем:

Нет

11. Материально-техническое обеспечение

Место выполнения научных исследований	Адрес	Основное оборудование, стенды, макеты, компьютерная техника, предустановленное программное обеспечение
Кафедра "Компьютерное моделирование и нанотехнологии" ЮУрГУ		ПК с выходом в интернет, доступ к суперкомпьютеру ЮУрГУ