

ЮЖНО-УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ
Директор института
Институт естественных и точных
наук

31.08.2017 А. В. Келлер

**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

Получение задела в научном исследовании для работы над диссертации

Задачи научных исследований

проведение серии компьютерных экспериментов

обработка результатов

оформление отчета

Краткое содержание научных исследований

работа по плану для формирования научного задела

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:методы и пакеты, предназначенные для изучения внутренней структуры материалов
	Уметь:осуществлять расчеты электронной и атомной структуры выбранных материалов
	Владеть:методиками проведения вычислительных экспериментов и программными продуктами, разработанными для этого

3. Место научных исследований в структуре ОП ВО

Перечень предшествующих дисциплин, видов работ	Перечень последующих дисциплин, видов работ
Научно-исследовательская деятельность (3 семестр)	Подготовка научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени (5 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 (3 семестр)	уметь проводить моделирование физических свойств материалов на распределенных вычислительных ресурсах
---	---

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 27, часов 972, недель 18.

№ раздела (этапа)	Наименование разделов (этапов)	Кол-во часов	Форма текущего контроля
1	Выполнение работы согласно плану	972	отчет

6. Содержание научных исследований

№ раздела (этапа)	Наименование или краткое содержание вида работ	Кол-во часов
1.1	Проведение вычислений в соответствии с планом работ	400
1.2	Обработка данных, анализ информации	400
1.3	Подготовка результатов к публикации	172

7. Формы отчетности

Научный отчет или статья

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	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 отчета в виде статьи готовой к публикации	зачтено: Работа выполнена согласно плану, результаты оформлены в виде статьи готовой к публикации незачтено: Работа выполнена не полностью, нет материала для публикации

8.3. Примерная тематика научных исследований

Исследование зависимости энергии связи водорода на границе зерен в железе от его положения

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. Гельчинский Б. Р., Мирзоев А. А., Воронцов А. Г. Вычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров //М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2011

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	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
3	Дополнительная литература	библиографическая и реферативная база данных	ScienceDirect	Интернет / Авторизованный
4	Дополнительная литература	библиографическая и реферативная база данных	SpringerLink	Интернет / Авторизованный

10. Информационные технологии, используемые при выполнении научных исследований

Перечень используемого программного обеспечения:

1. -SIESTa(бессрочно)
2. -GIMP 2(бессрочно)
3. -LibreOffice(бессрочно)
4. -Wien2k(бессрочно)
5. -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 доступом в интернет, суперкомпьютер Торнадо