

НАУЧНЫЙ КОМПОНЕНТ

План научной деятельности программы аспирантуры

Физическая химия (122- 01-08-144-фх-хн)

Научная (научно-исследовательская) деятельность по данной образовательной программе направлена на подготовку диссертации на соискание ученой степени кандидата наук к защите и включает в себя проведение научного исследования, подготовку публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации, в рецензируемых научных изданиях, в приравненных к ним научных изданиях, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus и международных базах данных, определяемых в соответствии с рекомендацией Высшей аттестационной комиссии при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, а также в научных изданиях, индексируемых в научометрической базе данных Russian Science Citation Index (RSCI), и (или) заявок на патенты на изобретения, полезные модели, промышленные образцы, селекционные достижения, свидетельства о государственной регистрации программ для электронных вычислительных машин, баз данных, топологий интегральных микросхем.

	Этапы освоения научного компонента программы аспирантуры и итоговая аттестация	Год обучения (курс)	Результаты
1. Примерный план научного исследования			
1.1.	Обоснование актуальности темы исследования, выбора объекта или предмета исследования в рамках направлений*, указанных в паспорте научной специальности и с учётом требований Положения о присуждении ученых степеней в МГУ им. М. В. Ломоносова	1	Утвержденная приказом по структурному подразделению тема диссертации в рамках программы аспирантуры и основных направлений научно-исследовательской деятельности структурного подразделения МГУ им. М. В. Ломоносова
1.2.	Определение задач и этапов исследования с указанием методов исследования и форм организации его проведения, составление индивидуального плана научной работы	1	Разработанный план научной работы аспиранта

1.3.	Корректировка индивидуального плана научной работы и (или) темы диссертации аспиранта в связи с незапланированными результатами, полученными в рамках выполнения работы (при необходимости)	2, 3	Скорректированный план научной деятельности аспиранта, утвержденная приказом по структурному подразделению тема диссертации в рамках программы аспирантуры и основных направлений научно-исследовательской деятельности структурного подразделения МГУ им. М. В. Ломоносова
1.4.	Проведение исследования	1, 2, 3,4	<i>(детализируется по видам работ с учетом специфики специальности и формам организации проведения исследования)</i>
1.4.1.	Изучение литературы с целью поиска и анализа основных результатов и положений, полученных ведущими специалистами в области проводимого исследования, анализа и усовершенствования существующих методик исследования (или: методик обработки экспериментальных данных, методов математического моделирования, методов изготовления объектов исследования), применимых в рамках работы по теме диссертации	1, 2, 3,4	Список литературных источников, проект раздела диссертационной работы «Обзор литературы» (на 4-м г.о. окончательно доработанный), проект раздела диссертационной работы «Основные методы исследований» (на 4-м г.о. окончательно доработанный)
1.4.2.	Оценка научной новизны, теоретическая и практическая значимость работы, выполняемая в рамках текущего этапа работы над диссертацией	1, 2, 3, 4	Проект раздела диссертационной работы «Введение», включающий в себя формулировку новизны, актуальности, теоретической и практической значимости работы на 4-м г.о. окончательно доработанный)
1.4.3.	Подбор (или разработка) оптимальных методик исследования (или: методик обработки экспериментальных данных, методов математического моделирования, методов изготовления объектов исследования, условий проведения экспериментальных и теоретических исследований), применимых в рамках работы по теме диссертации	1, 2, 3, 4	Список методик исследования, проект раздела диссертационной работы «Основные методы исследований» (на 4-м г.о. окончательно доработанный)

1.4.4.	Разработка, тестирование и отладка программных компонент для моделирования данных о явлениях (или расчёта характеристик объектов), изучаемых в рамках работы по теме диссертации (при необходимости)	1, 2, 3, 4	Программный код, результаты тестирования на известных объектах, оформленные в виде таблиц, графиков, диаграмм, спектров в сравнении с имеющимися в литературных источниках характеристиками
1.4.5.	Калибровка (или: юстировка, настройка, разработка) приборов, используемых для проведения исследований в рамках работы по теме диссертации (при необходимости)	1, 2, 3, 4	Результаты калибровки на известных объектах, оформленные в виде таблиц, графиков, диаграмм, спектров в сравнении с имеющимися в литературных источниках характеристиками
1.4.6.	Автоматизация получения данных с приборов, используемых для проведения исследований в рамках работы по теме диссертации (при необходимости)	1, 2, 3, 4	Результаты автоматизированных измерений, оформленные в виде таблиц, графиков, диаграмм, спектров
1.4.7.	Автоматизация обработки данных, экспериментально полученных в рамках работы по теме диссертации (при необходимости)	1, 2, 3, 4	Результаты автоматизированной обработки данных, оформленные в виде таблиц, графиков, диаграмм, спектров
1.4.8.	Выбор набора характеристики (или) свойств объектов исследования для изучения (или: для измерения, для определения) в рамках работы по теме диссертации	1, 2, 3	Набор характеристик объектов исследования
1.4.9.	Выбор параметров для изучения их влияния на характеристики объектов (или явлений), исследуемых в рамках работы по теме диссертации	1, 2, 3	Набор параметров для изучения их влияния на характеристики объектов исследования
1.4.10.	Изучение (или: измерение, определение, оценка) выбранного набора характеристик и (или) свойств объектов исследования существующими методиками, описанными в научной литературе и(или) самостоятельно разработанными методиками при различных параметрах	1, 2, 3, 4	Результаты измерений (или определения, оценки), оформленные в виде таблиц, графиков, диаграмм, спектров

1.5.	Апробация результатов исследования и публикация основных результатов	1, 2, 3, 4	<i>(детализируется по видам работ с учетом специфики специальности и формам аprobации)</i>
1.5.1.	Выступление с докладом на научной конференции, симпозиуме, форуме, школе (школе-семинаре), семинаре, съезде и ином российском или международном научном и научно-просветительском мероприятии	1, 2, 3, 4**	Программа мероприятия с указанием типа доклада (стендовый, приглашённый, пленарный, устный, интернет-доклад и др.), автора (коллектива авторов), времени проведения, сертификат или иной документ, выданный оргкомитетом мероприятия и подтверждающий участие аспиранта в роли докладчика
1.5.2.	Публикация тезисов доклада в трудах и сборниках на научной конференции, симпозиуме, форума, школы (школы-семинара), семинара, съезда и иного российского или международного научного и научно-просветительского мероприятия	1, 2, 3, 4**	Отиск тезисов доклада в трудах и сборниках на научной конференции, симпозиуме, форума, школы (школы-семинара), семинара, съезда и иного российского или международного научного и научно-просветительского мероприятия с указанием докладчика
1.5.3.	Внедрение экспериментальной методики и (или) программного обеспечения в производство, технологический или образовательный процесс или в иной вид практики (не обязательно)	1, 2, 3, 4	Протокол испытания (внедрения) экспериментальной методики и (или) программного обеспечения в производство, технологический или образовательный процесс или в иной вид практики, подписанный ответственным лицом организации
1.5.4.	Подготовка монографии, книги, брошюры или методического пособия на основании результатов исследования (не обязательно)	1, 2, 3, 4	Монография, книга (глава в книге), брошюра или методическое пособие. В качестве подтверждающих документов необходимо предоставить: выходные данные монографии, книги, брошюры или методического пособия с указанием области его применения, редакторов (при наличии) и рецензентов (при наличии).

1.5.5.	Публикация статей в рецензируемых научных журналах индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, или в издание из перечня, рекомендованного Минобрнауки России, по соответствующим специальностям и отраслям наук на основании решения Ученого совета МГУ по представлению Ученых советов структурных подразделений МГУ, и (или) регистрация результатов интеллектуальной деятельности (патент, свидетельство на полезную модель, промышленный образец, селекционные достижения; свидетельства на программу для электронных вычислительных машин, базу данных, топологию интегральных микросхем)	1, 2, 3, 4**	Отиск статьи (на 4-м году обучения не менее 3-х). В качестве подтверждающих документов необходимо предоставить первую страницу публикации с указанием названия статьи, списка авторов, названия журнала, выходных данных статьи, doi
1.6.	Промежуточная аттестация по этапам выполнения научного исследования	1, 2, 3, 4	Протокол заседания аттестационной комиссии, по результатам доклада аспиранта о научной работе, отзыв научного руководителя о проведении аспирантом этапов научно-исследовательской деятельности за отчетный период
1.7.	Представление доклада, в котором отражается основное содержание выполненной диссертационной работы	4	Протокол заседания аттестационной комиссии, по результатам доклада аспиранта о научной работе, отзыв научного руководителя о проведении аспирантом этапов научно-исследовательской деятельности за отчетный период, допуск к итоговой аттестации
2. План подготовки диссертации к защите			
2.1.	Обоснование структуры диссертации, формирование списка разделов и глав диссертации	1, 2, 3	Список разделов и глав диссертации
2.2	Формирование введения и заключения, в т.ч. анализ возможностей практического использования результатов, полученных в	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы

	рамках подготовки диссертации, в прикладных или теоретических исследованиях, анализ значения результатов, полученных в рамках подготовки диссертации, для выбранной области науки, оценка степени разработанности избранной темы диссертационного исследования, оценка научной новизны, теоретическая и практическая значимость работы, выполненной в рамках работы над диссертацией, оценка научной новизны, теоретическая и практическая значимость работы, выполненная в рамках диссертационного исследования, обоснование выбора методологии диссертационного исследования, формулировка и оформление положений, выносимых на защиту, подведение итогов выполненного исследования, анализ перспективы дальнейшей разработки выбранной темы диссертационного исследования,		
2.3.	Формирование глав, их частей или приложений, отражающих описание, обоснование применимости существующих (или самостоятельно разработанных) методик (или: методик обработки экспериментальных данных, методов математического моделирования, методов изготовления объектов исследования, условий проведения экспериментальных и теоретических исследований), используемых в рамках работы над диссертацией	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы
2.4.	Формирование глав, их частей или приложений, отражающих сравнение самостоятельно разработанной методологии исследований с уже существующими, анализ её сильных сторон и возможностей её применения для аналогичных исследований	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы

2.5.	Формирование глав, их частей или приложений, отражающих описание объектов (или явлений), изучаемых в рамках работы над диссертацией	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы
2.6.	Формирование глав, их частей или приложений, отражающих влияние выбранных параметров на характеристики объектов (или явлений), исследуемых в рамках работы по теме диссертации	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы
2.7.	Формирование списка сокращений и условных обозначений, словаря терминов, списка иллюстративного материала и иных приложений, включаемых в текст диссертации.	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы
2.8.	Оформление диссертации и автореферата в соответствии с требованиями Положения о присуждении ученых степеней в МГУ им. М. В. Ломоносова или иных диссертационных советов, которые осуществляют защиты по данной специальности.	4	Диссертация, автореферат, первичное рецензирование диссертации научным руководителем
2.4.	Написание, редактирование и отправка статьи в рецензируемое научное издание, индексируемое	1, 2, 3, 4	Выходные данные статьи (и/или: отиск статьи, справка о приеме в печать)
2.5.	Подготовка и оформление в установленном порядке патента на изобретение (или: патента (свидетельства) на полезную модель, промышленный образец, селекционные достижения; свидетельства на программу для электронных вычислительных машин, базу данных, топологию интегральных микросхем)	1, 2, 3, 4	Заявка на регистрацию (или документ, подтверждающий регистрацию) результатов интеллектуальной деятельности
2.6	Подготовка доклада, в котором представляются основное содержание диссертационной работы	1, 2, 3, 4	Рецензирование доклада научным руководителем
3. Итоговая аттестация		4	
3.1.	Представление диссертации для назначения рецензентов		Отзыв научного руководителя, рекомендованный научным руководителем список лиц для назначения рецензентами

3.2.	Рецензирование диссертации внутренними и (или) внешними рецензентами		Не менее 2 рецензий
3.3.	Оценка диссертации на предмет ее соответствия критериям, установленным в соответствии с ФЗ «О науке и государственной технической политике» на заседания научного подразделения (лаборатории, отдела и т.д)		Не более одного протокола заседания научного подразделения (лаборатории, отдела и т.д)
3.4.	Подготовка заключения по итогам оценки диссертации		Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным в соответствии с ФЗ «О науке и государственной научно-технической политике», вынесенное Учёным советом структурного подразделения

***Список направлений исследований, актуальный паспорту специальности:**

1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик.
2. Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов.
3. Определение термодинамических характеристик процессов на поверхности, установление закономерностей адсорбции на границе раздела фаз и формирования активных центров на таких поверхностях.
4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия. Компьютерное моделирование строения, свойств и спектральных характеристик молекул и их комплексов в простых и непростых жидкостях, а также ранних стадий процессов растворения и зародышеобразования.
5. Изучение физико-химических свойств изолированных молекул и молекулярных соединений при воздействии на них внешних электромагнитных полей, потока заряженных частиц, а также экстремально высоких/низких температурах и давлениях.
6. Химические превращения, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах.
7. Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация.
8. Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц.
9. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции.

10. Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства.
11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среди и белковом окружении.
12. Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.

****На 1, 2 году опционально, на 3 – рекомендовано, на 4 году обучения – обязательно.**