

## 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 наукометрической 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
<b>1. Примерный план научного исследования</b>			
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 апробации)</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, симпозиума, форума, школы (школы-семинара), семинара, съезда и иного российского или международного научного и научно-просветительского мероприятия	1, 2, 3, 4**	Оттиск тезисов доклада в трудах и сборниках на научной конференции, симпозиума, 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**	Оттиск 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
<b>2. План подготовки диссертации к защите</b>			
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

	<p>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,</p>		
2.3.	<p>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</p>	1, 2, 3, 4	Текст диссертационной работы
2.4.	<p>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</p>	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: оттиск 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
<b>3. Итоговая аттестация</b>		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 среды 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.**