

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий

Утверждено:  
решением ученого совета Университета  
протокол № 6  
от «27» апреля 2021 г.

**ПРОГРАММА**

**Учебной практики**

**Ознакомительная практика**

**04.04.01 Химия**

*Профиль*

**«Квантовые технологии, компьютерный наноинжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»**

Форма обучения **очная**

Барнаул 2021 г.

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 4 от «01» июля 2021 г.

---

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 5 от «01» июля 2022 г.

---

## 1. Вид практики, способы(при наличии) и формы ее проведения

**Вид практики:** учебная практика.

**Тип практики:** ознакомительная практика

**Способы проведения (при наличии):** стационарная / выездная.

**Форма проведения практики:** дискретная по периодам проведения.

### 2. Перечень планируемых результатов обучения при прохождении практики, соотнесённых с планируемыми результатами освоения ОПОП

#### 2.1 Универсальные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Категория (группа) универсальных компетенций	Код и наименование универсальной компетенции (УК)	Код и наименование индикатора достижения универсальной компетенции
Системное и критическое мышление	<b>УК-1.</b> Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода. УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели. УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для достижения поставленной цели
Самоорганизация и саморазвитие (в том числе здоровьесбережение)	<b>УК-6.</b> Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности. УК-6.2. Выстраивает индивидуальную образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач; применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания. УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.

#### 2.2. Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Общепрофессиональные навыки	<b>ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	<b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

### 3. Место практики в структуре образовательной программы

Учебная практика (ознакомительная практика) относится к обязательной части блока 2 «Практика» основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП ВО) по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

### 4. Объем практики

Объем практики составляет 3 зачетных единицы (108 ч.). Продолжительность практики регламентируется графиком учебного процесса.

### 5. Порядок организации и содержание практики

Практика проходит в форме индивидуальной самостоятельной работы студентов под руководством руководителя от кафедры.

Практика включает выполнение обучающимися ряда заданий, направленных на формирование требуемых компетенций, выполнение задач, определенных в индивидуальном задании на практику.

Содержание практики определяется кафедрой.

Практика начинается с установочного занятия (организационного собрания), на котором студенты знакомятся с целями и задачами практики, объемом и особенностями работ, требованиями к зачёту. Проводится инструктаж по технике безопасности.

Разделы (этапы) практики	Виды работы на практике, включая самостоятельную работу студентов	Формы текущего контроля
Организационный этап	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ (в АлтГУ и на месте прохождения практики).	Собеседование с руководителем практики
Основной этап	Учебная практика предполагает: 1. Знакомство со структурой предприятия (организации) и правилами внутреннего распорядка. Прохождение	Индивидуальные задания

	<p>инструктажа на рабочем месте по соблюдению правил техники безопасности</p> <p>2. Изучение научно-исследовательских направлений деятельности кафедры физической и неорганической химии. Изучение положений о кафедре физической и неорганической химии.</p> <p>3. Ознакомление, изучение ФГОС ВО 04.03.01 «Химия», 04.04.01 «Химия», 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»</p> <p>4. Ознакомление с учебно-методической документацией дисциплин преподаваемых на кафедре физической и неорганической химии.</p> <p>5. Ознакомление с возможностями дистанционного обучения в системе Moodle на образовательном портале АлтГУ</p>	
Заключительный этап	Оформление отчета Сдача отчета	Отчет по практике

#### **6. Формы отчетности по практике**

По завершению учебной практики (ознакомительной практики) на кафедру сдается: отчет по практике, в основе которого выполненное индивидуальное задание.

Итоговой формой контроля по практике является «зачет». Итоговая оценка выставляется преподавателем, осуществляющим руководство учебной (ознакомительной) практикой.

#### **7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике**

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике приведен в приложении 1.

#### **8. Перечень учебной литературы и ресурсов сети «Интернет», необходимых для проведения практики**

а) основная литература:

1. Федеральный государственный образовательный стандарт по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» высшего образования, утвержденный приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 23.09.2015г. №1042
2. ГОСТ Р 7.0.5.-2008. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления. Введ. 2009-01-01. – М.: Стандартинформ, 2008. – 22 с. (<http://gostexpert.ru/gost/gost-7.0.5-2008>).

б) дополнительная литература:

1. Положение «О практической подготовке обучающихся в ФГБОУ ВО "Алтайский государственный университет».

2. Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет»

в) ресурсы сети «Интернет»

1. Поисковые системы (Google, Yandex и др.).
2. Реферативная база данных ВИНТИ РАН.
3. Реферативная база данных научной периодики «Scopus» (<http://www.scopus.com/>).
4. Реферативно-библиографическая база данных научной периодики «WebofScience» (<http://www.webofknowledge.com/>).
5. Сеть патентной информации Европейского патентного ведомства «Espacenet» (<http://worldwide.espacenet.com/>).
6. Библиотека ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет (<http://elibrary.asu.ru/>)
7. Электронно-библиотечная система Издательства Лань (<https://e.lanbook.com/>)
8. Электронно-библиотечная система Университетская библиотека on-line (<http://biblioclub.ru>)
9. Электронная библиотека Юрайт (<https://biblio-online.ru/>)

#### **9. Перечень информационных технологий, используемых при проведении практики, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

информационные технологии, позволяющие эффективно организовать самостоятельную работу, индивидуализировать процесс обучения, активизировать познавательную деятельность обучающихся.

1. Microsoft Windows 7 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная);
2. Microsoft Office 2010 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная)..

#### **10. Материально-техническая база, необходимая для проведения практики**

Для полноценного прохождения практики обеспечен доступ студенту к современной аппаратуре (лабораторным установкам, приборам (соответствующим требованиям проведения современных методов контроля и анализа веществ), коммуникационному оборудованию, компьютерной технике и др.), информационным системам, программным продуктам, базам данных и т.д., находящихся на базах практики и используемых студентом для выполнения индивидуальных заданий в рамках прохождения практики.

#### **11. Организация практики для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) и инвалидов**

Практика является обязательным разделом адаптированной образовательной программы. Она представляет собой вид учебных занятий, непосредственно ориентированных на профессионально практическую подготовку обучающихся, в том числе обеспечивающую подготовку и защиту выпускной квалификационной работы.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья форма проведения практики устанавливается с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

При определении мест прохождения практики обучающимся инвалидом образовательная организация учитывает рекомендации, данные по результатам медико-социальной экспертизы, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости для прохождения практики создаются специальные рабочие места в соответствии с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности.

Оснащение (оборудование) специальных рабочих мест для практики обучающихся инвалидов осуществляется индивидуально для конкретного инвалида, а также для группы инвалидов, имеющих одностипные нарушения функций организма и ограничения жизнедеятельности.

При необходимости для прохождения практики инвалидами создаются специальные рабочие места с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности в соответствии с требованиями, утвержденными приказом Министерства труда России от 19 ноября 2013 года № 685н.

## **12. Методические рекомендации по организации и прохождению практики**

Перед прохождением практики обучающийся должен внимательно изучить программу практики и обратиться к соответствующим нормативным материалам с тем, чтобы быть подготовленным к выполнению поручений, данных руководителем практики. Обучающийся обязан:

1. Выполнить индивидуальный план прохождения практики и согласовать его с руководителем практики.
2. Соблюдать правила внутреннего распорядка предприятия, учреждения, организации, в которых он проходит практику.
3. Выполнять отдельные поручения руководителя практики, если это соответствует целям и задачам практики.
4. Не разглашать сведения, содержащие государственную, служебную, личную, семейную, коммерческую тайну, ставшие ему известными при прохождении практики.
5. Выполнять программу практики.
6. Подготовить материалы для отчета.
7. По окончании практики составить письменный отчет о прохождении практики и в установленный учебным планом срок защитить его.

Перед началом практики руководитель практики от кафедры проводит установочную конференцию, на которой обучающимся разъясняют порядок прохождения практики и ее содержание.

В период подготовки к практике и ее прохождении обучающийся:

- изучает необходимую научную литературу;
- по прибытии на место практики составляет индивидуальный план прохождения практики;
- строго соблюдает правила охраны труда и техники безопасности;
- поддерживает в установленные дни контакты с руководителем практики, а в случае возникновения непредвиденных обстоятельств или неясностей сообщает о них незамедлительно;
- реализует плановые мероприятия, предусмотренные программой практики;
- собирает и обобщает материалы, необходимые для подготовки отчета по практике;
- составляет отчет о проделанной работе и представляет его преподавателю-руководителю для подведения итогов практики.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

ФОНД  
ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ


по учебной практике  
ознакомительная практика


04.04.01 Химия

Профиль

«Квантовые технологии, компьютерный нанотехнологический инжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»

Разработчики:

Зав. кафедрой физической и  
неорганической химии  
/С.А. Безносюк/ 

Доцент кафедры физической  
и неорганической химии  
/О.А. Маслова/ 

Барнаул 2021



## ПАСПОРТ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 1. Перечень формируемых компетенций:

УК-1. Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий

УК-6. Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения

### 2. Планируемые результаты освоения дисциплины (модуля) / практики:

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины (модуля) / Контролируемые элементы практики	Код контролируемой компетенции (или её части)	Код и наименование индикатора достижения (только для ФГОС3++)	Наименование оценочного средства
1	2	3	4	5
1	Организационный этап	УК-1 УК-6 ОПК-1	<p>УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода.</p> <p>УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели.</p> <p>УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для достижения поставленной цели</p> <p>УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности.</p> <p>УК-6.2. Выстраивает индивидуальную образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач;</p>	Индивидуальные задания

			<p>применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания.</p> <p>УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.</p> <p>ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p>	
2	Основной этап	УК-1 УК-6 ОПК-1	<p>УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода.</p> <p>УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели.</p> <p>УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для достижения поставленной цели</p> <p>УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности.</p> <p>УК-6.2. Выстраивает индивидуальную</p>	Индивидуальные задания

			<p>образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач; применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания.</p> <p>УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.</p> <p>ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p>	
3	Заключительный этап	УК-1 УК-6 ОПК-1	<p>УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода.</p> <p>УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели.</p> <p>УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для</p>	Индивидуальные задания

			<p>достижения поставленной цели</p> <p>УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности.</p> <p>УК-6.2. Выстраивает индивидуальную образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач; применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания.</p> <p>УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.</p> <p>ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p>	
	<p>Промежуточная аттестация по практике - зачет</p>	<p>УК-1 УК-6 ОПК-1</p>	<p>УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода.</p> <p>УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной</p>	<p>отчет</p>

		<p>проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели.</p> <p>УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для достижения поставленной цели</p> <p>УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности.</p> <p>УК-6.2. Выстраивает индивидуальную образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач; применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания.</p> <p>УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.</p> <p>ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p>ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p>	
--	--	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

### **3. Типовые оценочные средства, необходимые для оценки планируемых результатов обучения по практике:**

#### **ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ ПО ПРАКТИКЕ**

**Оценочное средство-1:** индивидуальное задание.

**1. Цель:** ознакомление с научно-исследовательской, учебно-методической деятельностью кафедры и возможностями дистанционного обучения в системе Moodle на образовательном портале АлтГУ.

**2. Контролируемый раздел дисциплины (модуля):** Организационный этап, основной этап.

**3. Проверяемые компетенции (код):** УК-1, УК-6, ОПК-1

**4. Индикаторы достижения:**

УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода.

УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели.

УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для достижения поставленной цели

УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности.

УК-6.2. Выстраивает индивидуальную образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач; применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания.

УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.

ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

#### **5. Пример оценочного средства:**

Выполнение отчета по индивидуальным заданиям

1. Знакомство со структурой предприятия (организации) и правилами внутреннего распорядка. Прохождение инструктажа на рабочем месте по соблюдению правил техники безопасности

2. Изучение научно-исследовательских направлений деятельности кафедры физической и неорганической химии. Изучение положений о кафедре физической и неорганической химии.

3. Ознакомление, изучение ФГОС ВО 04.03.01 «Химия», 04.04.01 «Химия», 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия»

4. Ознакомление с учебно-методической документацией дисциплин преподаваемых на кафедре физической и неорганической химии.

5. Ознакомление с возможностями дистанционного обучения в системе Moodle на образовательном портале АлтГУ

## 6. Критерии оценивания

### Оценивание содержания отчета

бинарная шкала	Показатели	Критерии
зачтено	1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 3. Своевременность и последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета.	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.
не зачтено	4. Творческий подход студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета. 5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.	Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.

### 7. Рекомендуемый перечень вопросов для самостоятельной подготовки:

1. Роль научно-исследовательской работы в деятельности кафедры физической и неорганической химии. Изучение положений о кафедре физической и неорганической химии
2. Место научно-исследовательской деятельности в стандартах ФГОС ВО по направлениям и специальностям подготовки
3. Научно-методическая и учебная документация дисциплин преподаваемых на кафедре физической и неорганической химии
4. Возможностями дистанционного обучения в системе Moodle на образовательном портале АлтГУ для проведения научно-исследовательской работы студентов на кафедре физической и неорганической химии

### ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ПРАКТИКЕ

1. Форма проведения промежуточной аттестации: зачет.
2. Процедура проведения: аттестация по итогам практики проводится на основании оформленного в соответствии с требованиями, установленными программой практики отчета по практике, в котором руководителем практики выставляется оценка. По итогам аттестации выставляется зачет.

### КИМ (контрольно-измерительные материалы) включают:

письменный отчет по практике.

### **3. Проверяемые компетенции (код): УК-1, УК-6, ОПК-1**

#### **4. Индикаторы достижения:**

УК-1.1. Знает методы и основные принципы критического анализа и оценки проблемных ситуаций на основе системного подхода.

УК-1.2. Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи внутри; осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации; определяет стратегию достижения поставленной цели.

УК-1.3. Применяет навыки критического анализа проблемных ситуаций на основе системного подхода и определяет стратегию действий для достижения поставленной цели

УК-6.1. Проводит самоанализ и самооценку, определяет направления повышения личной эффективности в профессиональной деятельности.

УК-6.2. Выстраивает индивидуальную образовательную траекторию развития; планирует свою профессионально-образовательную деятельность; критически оценивает эффективность использования времени и других ресурсов при решении поставленных задач; применяет разнообразные способы, приемы техники самообразования и самовоспитания.

УК-6.3. Владеет навыками эффективного целеполагания; приемами саморегуляции, регуляции поведения в сложных, стрессовых ситуациях.

ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

#### **5. Пример оценочного средства:**

В отчете по учебной практике отражается проделанная студентом работа по заданиям, приведенным в программе практики. Отчет оформляется согласно требованиям и сдается на кафедру в печатном виде. Отчет студента по практике состоит из титульного листа, листа с заданием и непосредственно, отчета. Титульный лист является первой страницей отчета и служит источником информации об авторе, руководителях практики, месте и времени написания отчета. Лист с заданием содержит индивидуальные задания и сроки их выполнения. В отчете студент приводит результаты прохождения практики согласно индивидуальным заданиям.

#### **Пример отчета:**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Алтайский государственный университет»

Институт химии и химико-фармацевтических технологий

Кафедра физической и неорганической химии

ОТЧЕТ

о прохождении учебной практики

(ознакомительной практики)

Выполнил(а) студент(ка)

\_\_\_\_\_ курса, \_\_\_\_\_ группы



Направление подготовки 04.04.01 Химия

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Руководитель практики

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Оценка \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_  
(дата сдачи отчета)

БАРНАУЛ 20\_\_

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии  
ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ  
на учебную практику  
(ознакомительную практику)

Студент \_\_\_\_\_

Курс \_\_\_\_\_ группа \_\_\_\_\_ направление подготовки 04.04.01 Химия \_\_\_\_\_

Направленность (профиль) \_\_\_\_\_

Сроки прохождения практики \_\_\_\_\_

Место прохождения практики \_\_\_\_\_

№ п/п	Содержание индивидуальных заданий	Рабочий график (план) выполнения
	Знакомство со структурой предприятия (организации) и правилами внутреннего распорядка. Прохождение инструктажа на рабочем месте по соблюдению правил техники безопасности	
	Роль научно-исследовательской работы в направлениях деятельности кафедры физической и неорганической химии. Изучение положений о кафедре физической и неорганической химии	
	Ознакомление, изучение ФГОС ВО 04.03.01 «Химия», 04.04.01 «Химия», 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» и определение в них места практики	
	Ознакомление с направлениями научно-исследовательской работы кафедры физической и неорганической химии.	

Руководитель практики \_\_\_\_\_

(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /

(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

### **1 Введение**

**Вид практики:** учебная практика. Учебная практика проводится в целях получения первичных профессиональных умений и навыков.

**Тип:** практика по получению первичных профессиональных умений и навыков.

**Способы проведения практики:** стационарная. Стационарной является практика, которая проводится в обучающей организации (далее – организация).

### **Практика проводится в следующей форме:**

а) непрерывно - путем выделения в календарном учебном графике непрерывного периода учебного времени для проведения всех видов практик, предусмотренных ОПОП ВО;

**Целью практики по получению первичных профессиональных умений и навыков** закрепление и углубление знаний и умений, полученных магистрантами в процессе обучения, овладение системой первичных профессиональных умений, навыков и компетенций, а также приобретение начального опыта самостоятельной профессиональной деятельности по основным ее видам (научно-исследовательской, аналитической, педагогической).

### **Задачами практики являются:**

- научно-исследовательская деятельность: критически оценивать результаты, полученные отечественными и зарубежными исследователями, выявлять перспективные направления, составлять программу исследований; обосновывать актуальность, теоретическую и практическую значимость избранной темы научного исследования;

- приобретение опыта научно-исследовательской работы, как индивидуальной, так и в составе научных коллективов и структурных подразделений научных учреждений;

- сбор материала для выполнения научно-исследовательской работы и написания выпускной работы магистра.

### **1. Состав кафедры**

- Безносюк Сергей Александрович - заведующий кафедрой физической и неорганической химии, доктор физико-математических наук, профессор
- Ильина Елена Георгиевна химический факультет, доцент кафедры физической и неорганической химии

- Маслова Ольга Андреевна химический факультет, доцент кафедры физической и неорганической химии
- Новоженев Владимир Антонович химический факультет, профессор кафедры физической и неорганической химии
- Стась Ирина Евгеньевна химический факультет, доцент кафедры физической и неорганической химии
- Стручева Наталья Егоровна химический факультет, доцент кафедры физической и неорганической химии
- Терентьева Юлия Владимировна химический факультет, старший преподаватель кафедры физической и неорганической химии
- Харнутова Елена Павловна химический факультет, доцент кафедры физической и неорганической химии
- Шипунов Борис Павлович химический факультет, доцент кафедры физической и неорганической химии
- Белова Ольга Владимировна - ведущий инженер
- Фурина Марина Ивановна - ведущий инженер
- Соклакова Светлана Викторовна - ведущий инженер
- Сорокина Светлана Анатольевна - ведущий инженер
- Репейкова Людмила Юрьевна - ведущий инженер

## **2. Направление деятельности кафедры**

Кафедра физической и неорганической химии участвует в реализации основных образовательных программ по направлениям подготовки «Химия» – бакалавриат, магистратура, аспирантура; а также специальности 020201.65 «Фундаментальная и прикладная химия» со специализацией подготовки выпускников 020201.04 – «Физическая химия твердых тел, коллоидных систем и наноматериалов».

Профиль бакалавриата на кафедре ФиНХ по направлению подготовки 04.03.01 Химия – «Физическая химия и нанотехнологии функциональных материалов». Ежегодно его выбирают свыше десяти студентов химического факультета АГУ.

На кафедре ФиНХ реализуются по направлению подготовки 04.04.01 Химия две специализированные магистерские программы: «Наноинжиниринг функциональных и биомиметических материалов», «Физическая химия». Ежегодно на эти магистерские образовательные программы зачисляются 8 человек из числа поступивших в магистратуру химического факультета. На кафедре ФиНХ имеется аспирантура по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

## 6. Критерии оценивания

### Оценивание содержания отчета

бинарная шкала	Показатели	Критерии
зачтено	<p>1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в отчете.</p> <p>2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете.</p> <p>3. Своевременность и последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета.</p>	<p>Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.</p>
Не зачтено	<p>4. Творческий подход студента при выполнении индивидуального задания и оформлении отчета.</p> <p>5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.</p>	<p>Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.</p>

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий

Утверждено:  
решением ученого совета Университета  
протокол № 6  
от «27» апреля 2021 г.

**ПРОГРАММА**

**Производственной практики**

**Научно-исследовательская работа (1-3 семестр)**

**04.04.01 Химия**

*Профиль*

**«Квантовые технологии, компьютерный наноинжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»**

Форма обучения **очная**

Барнаул 2021 г.

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 4 от «01» июля 2021 г.

---

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 5 от «01» июля 2022 г.

---

## 1. Вид практики, способы (при наличии) и формы ее проведения

**Вид практики:** производственная практика.

**Тип практики:** научно-исследовательская работа

**Способы проведения (при наличии):** стационарная / выездная.

**Форма проведения практики:** дискретная по периодам проведения.

## 2. Перечень планируемых результатов обучения при прохождении практики, соотнесённых с планируемыми результатами освоения ОПОП

### 2.1. Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Общепрофессиональные навыки	<b>ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	<b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.
	<b>ОПК-2.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	<b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований. <b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.
Представление результатов профессиональной деятельности	<b>ОПК-4.</b> Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов	<b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы. <b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов. <b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР. <b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

## 2.2. Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения в области и (или) сфере профессиональной деятельности выпускников

Тип задачи профессиональной деятельности	Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
Научно-исследовательский	<b>ПК-1.</b> Способен осуществлять научно-исследовательские разработки в области новейших квантовых технологий, компьютерного наноинжиниринга и физикохимии	<b>ПК-1.1.</b> Знает теоретические основы и методологию квантовых технологий, компьютерного наноинжиниринга и физикохимии материалов. <b>ПК-1.2.</b> Умеет планировать этапы исследования по изучению наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами. <b>ПК-1.3.</b> Владеет навыками применения современного программного обеспечения при



	материалов	проведении разработок в области новейших квантовых технологий, компьютерного наноинжиниринга и физикохимии материалов. <b>ПК-1.4.</b> Умеет представлять результаты научно-исследовательских разработок с использованием ИКТ.
	<b>ПК-2.</b> Способен планировать и осуществлять научно-исследовательскую деятельность и выбирать методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии в составе научного коллектива.	<b>ПК-2.1.</b> Знает методы и методологию планирования научно-исследовательской деятельности в составе научного коллектива. <b>ПК-2.2.</b> Умеет составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий научно-исследовательской деятельности. <b>ПК-2.3.</b> Умеет применять расчетно-теоретические, экспериментальные методы и методики решения поставленных научно-исследовательских задач выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии. <b>ПК-2.4.</b> Умеет представлять результаты научно-исследовательских разработок с использованием ИКТ.
	<b>ПК-3.</b> Способен проводить обработку и анализ научно-технической информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии	<b>ПК-3.1.</b> Знает общие принципы обработки и анализа информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии. <b>ПК-3.2.</b> Умеет проводить поиск специализированной информации в научной литературе и информационных базах данных <b>ПК-3.3.</b> Умеет анализировать и обобщать результаты научно-исследовательской деятельности по тематике исследования в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии.

### 3. Место практики в структуре образовательной программы

Производственная практика (научно-исследовательская работа) относится к обязательной части блока 2 «Практика» основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП ВО) по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

### 4. Объем практики

Объем практики составляет 15 зачетных единицы (540 ч.) распределенных на три семестра: 1 семестр - 6 з.е., 2 семестр – 6 з.е., 3 семестр 3 з.е. Продолжительность практики регламентируется графиком учебного процесса.

### 5. Порядок организации и содержание практики

Практика проходит в форме индивидуальной самостоятельной работы студентов под руководством руководителя от кафедры или профильных организаций.

Практика включает выполнение обучающимися ряда заданий, направленных на формирование требуемых компетенций, выполнение задач, определенных в индивидуальном задании на практику.

Содержание практики определяется кафедрой.

Практика начинается с установочного занятия (организационного собрания), на котором студенты знакомятся с целями и задачами практики, объёмом и особенностями работ, требованиями к зачёту. Проводится инструктаж по технике безопасности.

<b>Разделы (этапы) практики</b>	<b>Виды работы на практике, включая самостоятельную работу студентов</b>	<b>Формы текущего контроля</b>
Организационный этап	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ (в АлтГУ и на месте прохождения практики).	Собеседование с руководителем практики
Основной этап	1. Выбор направления научного исследования (1 семестр) 2. Подготовка библиографического списка по теме исследования 3. Освоение и применение освоенных методов исследования	Индивидуальные задания
Заключительный этап	1. Оформление отчета 2. Сдача отчета	Отчет по практике

#### **6. Формы отчетности по практике**

По завершению производственной практики (научно-исследовательская работа (1-3 семестр)) на кафедру сдаются: отчет по практике, в основе которого выполненное индивидуальное задание и характеристика с места прохождения практики (только в случае прохождения практики в профильных организациях), с обязательным указанием факта ознакомления с инструкциями по охране труда и технике безопасности.

#### **7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике**

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике приведен в приложении 1.

#### **8. Перечень учебной литературы и ресурсов сети «Интернет», необходимых для проведения практики**

а) основная литература:

1. Федеральным государственным образовательным стандартом по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» высшего образования, утвержденный приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 23.09.2015г. №1042
2. ГОСТ Р 7.0.5.-2008. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления. Введ. 2009-01-01. – М.: Стандартинформ, 2008. – 22 с. (<http://gostexpert.ru/gost/gost-7.0.5-2008>).

б) дополнительная литература:

1. Положение «О практической подготовке обучающихся в ФГБОУ ВО "Алтайский государственный университет».
2. Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет»

в) ресурсы сети «Интернет»

1. Поисковые системы (Google, Yandex и др.).

2. Реферативная база данных ВИНТИ РАН.
3. Реферативная база данных научной периодики «Scopus» (<http://www.scopus.com/>).
4. Реферативно-библиографическая база данных научной периодики «WebofScience» (<http://www.webofknowledge.com/>).
5. Сеть патентной информации Европейского патентного ведомства «Espacenet» (<http://worldwide.espacenet.com/>).
6. Библиотека ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет (<http://elibrary.asu.ru/>)
7. Электронно-библиотечная система Издательства Лань (<https://e.lanbook.com/>)
8. Электронно-библиотечная система Университетская библиотека on-line (<http://biblioclub.ru>)
9. Электронная библиотека Юрайт (<https://biblio-online.ru/>)

**9. Перечень информационных технологий, используемых при проведении практики, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

информационные технологии, позволяющие эффективно организовать самостоятельную работу, индивидуализировать процесс обучения, активизировать познавательную деятельность обучающихся.

1. MicrosoftWindows 7 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная);
2. MicrosoftOffice 2010 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная)..

**10. Материально-техническая база, необходимая для проведения практики**

Для полноценного прохождения практики обеспечен доступ студенту к современной аппаратуре (лабораторным установкам, приборам (соответствующим требованиям проведения современных методов контроля и анализа веществ), коммуникационному оборудованию, компьютерной технике и др.), информационным системам, программным продуктам, базам данных и т.д., находящихся на базах практики и используемых студентом для выполнения индивидуальных заданий в рамках прохождения практики.

**11. Организация практики для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) и инвалидов**

Практика является обязательным разделом адаптированной образовательной программы. Она представляет собой вид учебных занятий, непосредственно ориентированных на профессионально практическую подготовку обучающихся, в том числе обеспечивающую подготовку и защиту выпускной квалификационной работы.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья форма проведения практики устанавливается с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

При определении мест прохождения практики обучающимся инвалидом образовательная организация учитывает рекомендации, данные по результатам медико- социальной экспертизы, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости для прохождения практики создаются специальные рабочие места в соответствии с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности.

Оборудование (оборудование) специальных рабочих мест для практики обучающихся инвалидов осуществляется индивидуально для конкретного инвалида, а также для группы инвалидов, имеющих однотипные нарушения функций организма и ограничения жизнедеятельности.

При необходимости для прохождения практики инвалидами создаются специальные рабочие места с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности в соответствии с требованиями, утвержденными приказом Министерства труда России от 19 ноября 2013 года № 685н.

## **12. Методические рекомендации по организации и прохождению практики**

Перед прохождением практики обучающийся должен внимательно изучить программу практики и обратиться к соответствующим нормативным материалам с тем, чтобы быть подготовленным к выполнению поручений, данных руководителем практики. Обучающийся обязан:

1. Выполнить индивидуальный план прохождения практики и согласовать его с руководителем практики.
2. Соблюдать правила внутреннего распорядка предприятия, учреждения, организации, в которых он проходит практику.
3. Выполнять отдельные поручения руководителя практики, если это соответствует целям и задачам практики.
4. Не разглашать сведения, содержащие государственную, служебную, личную, семейную, коммерческую тайну, ставшие ему известными при прохождении практики.
5. Выполнять программу практики.
6. Подготовить материалы для отчета.
7. По окончании практики составить письменный отчет о прохождении практики и в установленный учебным планом срок защитить его.

Перед началом практики руководитель практики от кафедры проводит установочную конференцию, на которой обучающимся разъясняют порядок прохождения практики и ее содержание.

В период подготовки к практике и ее прохождении обучающийся:

- изучает необходимую научную литературу;
- по прибытии на место практики составляет индивидуальный план прохождения практики;
- строго соблюдает правила охраны труда и техники безопасности;
- поддерживает в установленные дни контакты с руководителем практики, а в случае возникновения непредвиденных обстоятельств или неясностей сообщает о них незамедлительно;
- реализует плановые мероприятия, предусмотренные программой практики;
- собирает и обобщает материалы, необходимые для подготовки отчета по практике;
- составляет отчет о проделанной работе и представляет его преподавателю-руководителю для подведения итогов практики.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

ФОНД  
ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ


по производственной практике  
научно-исследовательская работа (1-3 семестр)


04.04.01 Химия

Профиль

**«Квантовые технологии, компьютерный нанотехнологический инжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»**

Разработчики:

Зав. кафедрой физической и  
неорганической химии  
/С.А. Безносюк/ 

Доцент кафедры физической  
и неорганической химии  
/О.А. Маслова/ 

Барнаул 2021

## ПАСПОРТ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 1. Перечень формируемых компетенций:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения

ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-4. Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов

ПК-1. Способен осуществлять научно-исследовательские разработки в области новейших квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инжиниринга и физикохимии материалов

ПК-2. Способен планировать и осуществлять научно-исследовательскую деятельность и выбирать методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии в составе научного коллектива.

ПК-3. Способен проводить обработку и анализ научно-технической информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии

### 2. Планируемые результаты освоения дисциплины (модуля) / практики:

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины (модуля) / Контролируемые элементы практики	Код контролируемой компетенции (или её части)	Код и наименование индикатора достижения (только для ФГОС3++)	Наименование оценочного средства
1	2	3	4	5
1	Организационный этап	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4 ПК-1 ПК-2 ПК-3	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов</p>	Индивидуальные задания

			<p>полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
2	Основной этап	<p>ОПК-1</p> <p>ОПК-2</p> <p>ОПК-3</p> <p>ОПК-4</p> <p>ПК-1</p> <p>ПК-2</p> <p>ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз</p>	Индивидуальные задания

			<p>данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
3	Заключительный этап	<p>ОПК-1</p> <p>ОПК-2</p> <p>ОПК-3</p> <p>ОПК-4</p> <p>ПК-1</p> <p>ПК-2</p> <p>ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач</p>	Индивидуальные задания



			<p>в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
	Промежуточная аттестация по практике -	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3	<b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.	отчет

	<p>дифференцированный зачет</p>	<p>ОПК-4 ПК-1 ПК-2 ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на</p>	
--	---------------------------------	-----------------------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

			текущих занятиях и других видах учебной деятельности.	
--	--	--	-------------------------------------------------------	--

### 3. Типовые оценочные средства, необходимые для оценки планируемых результатов обучения по практике:

#### ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ ПО ПРАКТИКЕ

**Оценочное средство-1:** индивидуальное задание.

- 1. Цель:** выполнение научно-исследовательской работы, освоение методик исследования
- 2. Контролируемый раздел дисциплины (модуля):** Организационный этап, основной этап.
- 3. Проверяемые компетенции (код):** ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ПК-1, ПК-2, ПК-3

#### 4. Индикаторы достижения:

- ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.
- ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.
- ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.
- ОПК-2.1. Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.
- ОПК-2.2. Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.
- ОПК-2.3. Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.
- 3.1. Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.
- ОПК-3.2. Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.
- ОПК-3.2. Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.
- ОПК-4.1. Знает методы и методологию представления результатов научной работы.
- ОПК-4.2. Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.
- ОПК-4.3. Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.
- ОПК-4.4. Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

#### 5. Пример оценочного средства:

Выполнение отчета по индивидуальным заданиям

6. Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ. Собеседование с руководителем практики
7. Выбор направления научного исследования (1 семестр)
8. Подготовка библиографического списка по теме исследования
9. Освоение и применение освоенных методов исследования

#### 6. Критерии оценивания

##### Оценивание содержания отчета

4-балльная шкала	Показатели	Критерии
Отлично	1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий

	отчете. 2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 3. Своевременность и	подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.
Хорошо	последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета. 4. Творческий подход	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, имеются отдельные недостатки в оформлении отчета по представленному материалу.
Удовлетворительно	студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета. 5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.	Задание в целом выполнено, однако имеются недостатки при выполнении в ходе практики отдельных разделов (частей) задания, имеются замечания по оформлению собранного материала в отчете.
Неудовлетворительно		Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.

#### 7. Рекомендуемый перечень вопросов для самостоятельной подготовки:

1. Выбор направления научного исследования (1 семестр)
2. Состояние вопроса актуальности темы исследования
3. Освоенные методы исследования

#### ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ПРАКТИКЕ

1. Форма проведения промежуточной аттестации: дифференцированный зачет (зачет с оценкой).
2. Процедура проведения: аттестация по итогам практики проводится на основании оформленного в соответствии с требованиями, установленными программой практики отчета по практике, в котором руководителем практики выставляется оценка. По итогам аттестации выставляется дифференцированный зачет (зачет с оценкой).

#### КИМ (контрольно-измерительные материалы) включают:

письменный отчет по практике.

#### 3. Проверяемые компетенции (код): ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ПК-1, ПК-2, ПК-3

#### 4. Индикаторы достижения:

ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.1. Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.2. Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.

ОПК-2.3. Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

-3.1. Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ОПК-4.1. Знает методы и методологию представления результатов научной работы.

ОПК-4.2. Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.

ОПК-4.3. Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.

ОПК-4.4. Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

### **5. Пример оценочного средства:**

В отчете по учебной практике отражается проделанная студентом работа по заданиям, приведенным в программе практики. Отчет оформляется согласно требованиям и сдается на кафедру в печатном виде. Отчет студента по практике состоит из титульного листа, листа с заданием и непосредственно, отчета. Титульный лист является первой страницей отчета и служит источником информации об авторе, руководителях практики, месте и времени написания отчета. Лист с заданием содержит индивидуальные задания и сроки их выполнения. В отчете студент приводит результаты прохождения практики согласно индивидуальным заданиям.

### **Пример отчета:**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

#### **ОТЧЕТ**

о прохождении производственной практики  
(научно-исследовательская работа)

Выполнил(а) студент(ка)

\_\_\_\_ курса, \_\_\_\_ группы

Направление подготовки 04.04.01 Химия

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Руководитель практики

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Оценка \_\_\_\_\_

(дата сдачи отчета)

БАРНАУЛ 20\_\_

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии  
ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ  
на производственную практику  
(научно-исследовательская работа)

Студент \_\_\_\_\_  
Курс \_\_\_\_\_ группа \_\_\_\_\_ направление подготовки 04.04.01 Химия \_\_\_\_\_  
Направленность (профиль) \_\_\_\_\_  
Сроки прохождения практики \_\_\_\_\_  
Место прохождения практики \_\_\_\_\_

№ п/п	Содержание индивидуальных заданий	Рабочий график (план) выполнения
	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ. Собеседование с руководителем практики	
	Выбор направления научного исследования	
	Подготовка литературного обзора по теме «Интерметаллиды состава никель-алюминий»	
	Освоение метода молекулярной механики и квантовой нанокинетики	
	Оформление отчета	
	Сдача отчета	

Руководитель практики \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

### 1 Композиционные материалы на основе никеля-алюминия.

В промышленности в качестве конструкционных материалов все шире применяются интерметаллиды. Интерметаллид - это химическое соединение, образованное двумя или более металлами. Интерметаллиды имеют фиксированное соотношение между компонентами. Для интерметаллидов характерна преимущественно металлическая связь между атомами в решетке, однако существуют интерметаллиды с ионным и ковалентным типами химической связи, а также промежуточные случаи (ионно-металлическая и ковалентно-металлическая связь).

Интерметаллиды обладают, как правило, высокой твердостью и высокой химической стойкостью. Очень часто интерметаллиды имеют более высокую температуру

плавления, чем исходные металлы. Интерметаллиды менее пластичны, чем исходные металлы, и сообщают повышенную хрупкость сплавам, в структуру которых они входят, так как связь между атомами в решетке в них является переходной от металлической к ковалентной или ионной.

Высокая хрупкость многих интерметаллидов, особенно при комнатной температуре, ограничивает их область применения. Однако интерметаллидные сплавы могут успешно применяться для формирования поверхностных слоев деталей, от которых требуются повышенные эксплуатационные свойства (износостойкость, жаростойкость, коррозионная стойкость).

### **1.1 Свойства и область применения интерметаллидных сплавов**

Интерметаллическими соединениями, или интерметаллидами, называют соединения металлов между собой, причем к компонентам интерметаллидов относят также и полуметаллы - кремний и германий. Самая общая классификация интерметаллидов включает дальтониды, бертоллиды и фазы Курнакова [1].

К настоящему времени обнаружено и описано более 1500 интерметаллических соединений, которые образуют около 200 различных типов кристаллических структур [2].

Наибольший практический интерес представляют алюминиды и сплавы на их основе, что обусловлено следующими причинами:

а) алюминиды и сплавы на их основе обладают высокими прочностными и жаропрочными характеристиками при рабочих температурах, свойственных никелевым сплавам и выше них (при меньшей плотности) [3];

б) алюминий существенно понижает плотность сплавов. Так, в частности, плотность интерметаллида  $TiAl$  в 2,5 раза меньше, чем у жаропрочных никелевых сплавов. Пониженная плотность алюминидов способствует повышению удельных характеристик прочности и жаропрочности. Заметим, что в последнее время большое внимание уделяется одному из самых легких интерметаллидов  $MgSi$  ( $1,94 \text{ г/м}^3$ ) [4];

в) по сравнению с другими материалами алюминиды обладают высоким сопротивлением окислению. Одним из лучших материалов в этом отношении является интерметаллид  $FeAl$ , обладающий к тому же и высокой коррозионной стойкостью. Высокой жаростойкостью обладают также силициды, но для них труднее решается проблема устранения их хрупкости;

г) алюминий относится к сравнительно недорогим, недефицитным легирующим элементам [5].

Основные факторы, затрудняющие применение интерметаллидов и сплавов на их основе как конструкционных материалов, следующие: свойственная интерметаллидам хрупкость, особенно при комнатной температуре; недостаточное в некоторых случаях сопротивление окислению; ненадежность методов проектирования и предсказания длительности эксплуатации изделий из интерметаллидов; отсутствие поставщиков качественной продукции из интерметаллидов; высокая стоимость изделий.

Способы повышения пластичности интерметаллидов включают микролегирование, легирование, формирование оптимальной микроструктуры, повышение чистоты исходных материалов [6].

Микролегирование обычно проводится не только с целью повышения пластичности, но и улучшения всего комплекса эксплуатационных свойств. Повышение пластичности при микролегировании может быть достигнуто в результате уменьшения ковалентной составляющей связи, сознания благоприятной дислокационной структуры с более высокой подвижностью дислокаций, обеспечения действия более благоприятных систем скольжения, изменения кристаллического или фазового состава и структурного состояния.

К новым направлениям легирования следует отнести упрочнение интерметаллидов дисперсными частицами. Дисперсное упрочнение, реализуемое методами порошковой металлургии, обеспечивают оксиды.

Большое значение имеет также чистота исходных материалов, особенно по легкоплавким примесям, сегрегация которых на границах зерен вызывает хрупкое межзеренное разрушение.

Интерметаллиды уже давно применяют в технике для различных назначений. Хорошо известно применение алюминидов и силицидов в качестве защитных покрытий при горячем деформировании и термической обработке химически активных металлов. Интерметаллиды составляют основу сплавов - накопителей водорода, легко поглощающих большие количества водорода при температурах, близких к комнатной, и отдающих его при невысоком нагреве при понижении его давления [7].

Большое значение имеет также чистота исходных материалов, особенно по легкоплавким примесям, сегрегация которых на границах зерен вызывает хрупкое межзеренное разрушение.

Интерметаллиды уже давно применяют в технике для различных назначений. Хорошо известно применение алюминидов и силицидов в качестве защитных покрытий при горячем деформировании и термической обработке химически активных металлов. Интерметаллиды составляют основу сплавов - накопителей водорода, легко поглощающих большие количества водорода при температурах, близких к комнатной, и отдающих его при невысоком нагреве при понижении его давления [8].

Сплавы на основе алюминидов широко применяются в качестве покрытий. Наиболее применимы покрытия на основе интерметаллидных фаз  $Ni_3Al$  и  $NiAl$ . Эти покрытия работают в условиях высоких температур и в окислительных средах [9].

### **1.2 Интерметаллидные сплавы на основе алюминидов никеля.**

Интерметаллическое соединение  $Ni_3Al$  ( $\gamma'$ -фаза) является основной упрочняющей фазой современных никелевых жаропрочных сплавов [10]. Особенностью этого соединения являются температурные аномалии его деформационных характеристик и связанный с ними эффект термического упрочнения. Благодаря этому исследуемый сплав имеет важное практическое значение. Основное направление исследований сплавов на основе  $Ni_3Al$ , как правило, связано с их механическими свойствами.

Изучению физических свойств соединения  $Ni_3Al$ , особенно в условиях легирования, уделялось меньше внимания, в то же время такое исследование представляет несомненный интерес.

Соединение  $Ni_3Al$  существует в узком интервале концентраций вблизи 75 ат. % Ni [10]. Характерной особенностью его является способность растворять практически все переходные элементы. Известно, что каждый легирующий элемент имеет свой тип замещения. Многочисленные экспериментальные данные [11] позволяют утверждать, что атомы Nb, Ti, V, W будут преимущественно замещать позиции алюминия, атомы Co входят в подрешетку никеля. Такие элементы, как Fe и Cr, могут в равной мере замещать как позиции никеля, так и позиции алюминия.

В настоящее время диаграммы состояния тройных сплавов на основе  $Ni_3Al$  построены в виде отдельных разрезов, как правило, изотермических [10, 12-15].

#### **1.2.1 Состав, структура и свойства алюминидов никеля.**

Фаза  $Ni_3Al$  является основой для создания суперсплавов нового поколения на никелевой основе [16 - 18]. Фаза со сверхструктурой  $L1_2$  на основе  $Ni_3Al$  обозначается как  $\gamma'$ -фаза, в отличие от неупорядоченного твердого раствора с ближним атомным порядком состава Ni—Al, который обозначается как  $\gamma$ -фаза (рис. 1). В  $\gamma'$ -фазе наблюдается аномальная температурная зависимость механических свойств [16].



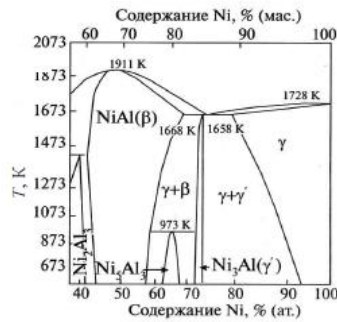


Рисунок 1. – Фрагмент фазовой диаграммы Al-Ni [19]

В современных жаропрочных никелевых сплавах эта аномалия проявляется в виде повышения предела текучести с ростом температуры в определенном температурном интервале. Такое поведение наблюдается исключительно в сплавах с дальним атомным порядком, то есть со сверхструктурой. Сверхструктура  $L1_2$  ( $\gamma'$ -фаза) (рисунок 2) реализуется при комнатной температуре в интервале концентраций 22,3—27% (ат.) Al. С увеличением температуры концентрационная область существования  $\gamma'$ -фазы уменьшается.

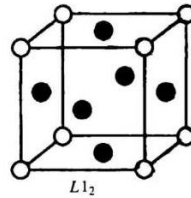


Рисунок 2. – Сверхструктура  $L1_2$ .

Развитие работ по созданию суперсплавов на никелевой основе привело к постепенному перемещению их составов вдоль двухфазной области ( $\gamma + \gamma'$ ) от незначительного содержания  $\gamma'$ -фазы к почти полному доминированию ее в объеме сплава [17]. В последние 20 лет область концентраций меньше 75% (ат.) Ni является основой для поиска новых суперсплавов.

Авторами монографии [17] показано, что как в самой простой форме  $A_3B$  ( $Ni_3Al$ ), так и в сложной  $A_3(BC)$ , например  $Ni_3(AlTi)$ , и в еще более сложных вариантах  $Ni_3(AlTiHf)$  свойства фазы  $Ni_3Al$  во многом определяют механическое поведение никелевых суперсплавов в широком температурном интервале.

В целом, при разработке жаропрочных сплавов необходимо обеспечивать баланс между жаростойкостью и механическими свойствами сплавов (твёрдостью, прочностью, пластичностью), что достигается комплексным легированием и оптимальной термомеханической обработкой.

В работе [20] в широком температурном интервале исследовано механическое поведение интерметаллида  $Ni_3Al$ , полученного методом быстрой закалки из жидкого состояния.

Согласно диаграмме состояния в сплавах системы Al-Ni образуется пять соединений:  $Al_3Ni$ ,  $Al_3Ni_2$ ,  $AlNi$  ( $\beta'$ ),  $AlNi_3$  ( $\alpha'$ ),  $Al_3Ni_5$ . Соединение  $Al_3Ni$  имеет постоянный состав, остальные соединения - существенные области гомогенности [4].

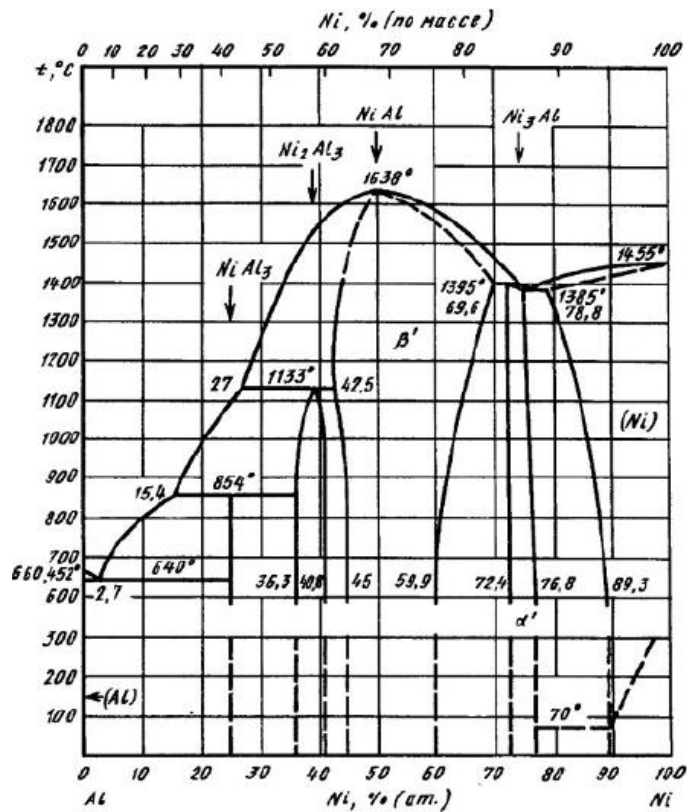


Рисунок 3. Диаграмма состояния Al-Ni

Из алюминидов никеля наибольший интерес как жаропрочные материалы представляют интерметаллиды  $Ni_3Al$  и  $NiAl$  (рис.1) обладающие при сравнительно небольшой плотности достаточно высокими характеристиками жаропрочности и жаростойкости [1].

Одна из задач легирования алюминидов  $Ni_3Al$  заключается в повышении его низкотемпературной пластичности и уменьшении склонности к межзеренному разрушению. Эта цель достигается легированием  $Ni_3Al$  такими элементами как В, Zr, Hf, Cr, Mn, Fe, Co, Si. Пластичность алюминидов никеля возрастает в результате уменьшения при легировании энергии активации термически активируемых дислокационных процессов и увеличения числа действующих систем скольжения.

### 1.2.2 Свойства наплавленных сплавов на основе алюминидов никеля.

Одним из способов формирования интерметаллидных покрытий системы никель-алюминий является наплавка.

Интерметаллидные сплавы системы никель-алюминий на основе фаз  $Ni_3Al$  и  $NiAl$  отличаются высокой жаростойкостью и могут успешно применяться для формирования постоянных кокильных покрытий для литья алюминидовых сплавов.

Механические и эксплуатационные свойства покрытия определяются прежде всего химическим и фазовым составом наплавленного металла. С повышением содержания алюминия твердость наплавленного металла увеличивается, что связано с увеличением доли твердых интерметаллидных фаз ( $NiAl$  и  $\gamma'$ ) в структуре покрытия [21].

### 1.2.3 Применение сплавов на основе алюминидов никеля.

Интерметаллическое соединение  $Ni_3Al$  со сверхструктурой типа  $L1_2$  является основной упрочняющей фазой жаропрочных никелевых сплавов, представляющих важную группу высокопрочных материалов. Эти сплавы применяются для изготовления турбинных лопаток, ответственных и наиболее нагруженных деталей авиационных и стационарных газотурбинных установок [22]. В настоящее время большое внимание уделяется увеличению мощности и к.п.д. газотурбинных установок, что обеспечивается значительным повышением температуры эксплуатации и рабочих напряжений. При этом для турбинных лопаток, работающих в форсированном режиме, используются те же

сплавы, что и при стандартных режимах без замены их на более жаропрочные и дорогостоящие. Сплавы при этом оказываются в экстремальных условиях по температуре и уровню напряжений. С этой точки зрения актуальной задачей является изучение механизмов деформации сплавов на основе  $Ni_3Al$  с целью оценки стабильности структурного состояния в условиях высокотемпературного нагружения [23].

Укажем некоторые приложения сплавов  $Ni_3Al$ :

- turbocharger роторы для дизельных двигателей. Сложнолегированные алюминиды (например состава  $Ni - 15,9Al - 8,0Cr - 0,8Mo - 1,0Zr - 0,03B$ ) обладают хорошими литейными качествами и усталостными свойствами, благодаря чему они могут заменить используемые обычно суперсплавы, такие как IN—713С;

- высокотемпературные штампы и формы. Хорошая стойкость к окислению при высоких температурах и высокая прочность при большой скорости деформации делают сплавы  $Ni_3Al$  привлекательными как материалы для горячей штамповки и как формы для выплавки стекла;

- зажимные приспособления в высокотемпературных печах. Благодаря стойкости к образованию карбидов и оксидов, сплавы  $Ni_3Al$  могут быть использованы в качестве крепления при термообработке деталей автомобилей;

- роллеры для прокатки стальных слябов. Высокотемпературная прочность, стойкость к окислению и коррозии сплавов  $Ni_3Al$  существенно уменьшают энергетические затраты (поскольку не требуется водяное охлаждение) и затраты на материалы, так как значительно увеличивается время эксплуатации;

- гидротурбины. Возможность использования алюминидов никеля для роторов гидротурбин обусловлена тем, что сплавы  $Ni_3Al$  обладают высоким сопротивлением к вибрационной кавитации в воде;

- режущий инструмент. Композиты вольфрам—карбид с покрытием из алюминидов никеля обладают большей прочностью (как при низких, так и при высоких температурах) и лучшими режущими свойствами, чем те же композиты с покрытием из кобальта;

- лопатки турбин для реактивных двигателей. Полученные путем направленной кристаллизации сложнолегированные сплавы  $Ni_3Al$ , например состава ( $Ni - 16,3Al - 8,2Mo - 0,26B$ ), обладают высокой прочностью и сопротивлением крипу при температурах выше  $1000\text{ }^\circ\text{C}$  в окисляющей атмосфере.

## **2 Метод квантовой нанокинетики при моделировании НЭМС**

### **2.1 Теоретическое введение**

Известно, что химические реакции в молекулах и в материалах, как реакции разрыва и образования химических связей атомов, происходят за счет сдвига ядер. Быстрота движения ядер характеризуется периодами их колебаний относительно положений равновесия. Реакция не может происходить за времена меньшие, чем периоды колебания ядер, поэтому они задают характерный «квант» времени химических реакций в веществе. Полное время протекания типичных элементарных химических реакций во всех веществах лежит в пределах  $10\text{—}10^4$  фс. Они делятся на протяжении от одного до сотен периодов колебания ядер.

Для изучения быстрых актов реакционных процессов с конца 1980-х годов применяется фемтосекундная лазерная спектроскопия, использующая временное сжатие лазерных световых импульсов. У истоков данного направления, получившего название «Фемтохимия», стоит имя Ахмеда Зевейла, получившего в 1999 г. Нобелевскую премию по химии за исследования в области фемтосекундной спектроскопии. К тому времени в исследовании химических процессов был достигнут нижний временной предел сжатия лазерных импульсов, составлявший 4 фс.

Считается, что дальше укорачивать импульсы бессмысленно, так как даже самые быстрые элементарные химические реакции делятся больше, чем 10 фс. Предполагается, что кроме химических реакций причин дискретизации кинетики процессов в веществе

нет. Так как в отсутствие химических реакций движение системы атомов и их связей описывается непрерывной эволюцией, то они теоретически исследуются компьютерным моделированием в соответствии с законами непрерывной молекулярной динамики. Однако в конце 90-х годов в рамках квантово-полевых концепций (термополевая динамика, квантово-полевая химия) конденсированного состояния были предсказаны полевые эффекты дискретизации эволюции плазмы электронов в наноструктурах вещества и в отсутствие химических реакций. Эффекты дополнительной дискретности кинетики наноструктурных процессов связаны с наличием в полевых плазменных системах кроме элементарных квантовых частиц ещё и временно-живущих составных квантовых частиц — компактонов (роевых пар электронов, электронов и антиэлектронов, их троек, четверок и т. д.). Теория компактонов была рассмотрена в одной из первых публикации по основам квантово-полевой химии в начале 90-х годов [24].

## 2.2 Методика выполнения компьютерного эксперимента.

Запустите программу «NanoEvolver» — Dissipative перед началом выполнения компьютерного эксперимента.

Из внешнего файла необходимо запустить модель структуры кубического кластера никеля  $Ni_{172}$  (File → Loadstructure...).

Затем, вызвать команду Graph... из меню View. Задать радиус обрезки, заведомо превышающий расстояние между наиболее удаленными атомами в структуре, например,  $1000000 a_0$ . Для этого в поле Maximum введите 1000000, затем введите 1000000 в поле Exactvalue и обязательно нажать Enter для применения изменений. При этом в главном окне должен отрисоваться полный граф наноструктуры. Далее следует закрыть окно Graph нажатием кнопки ОК.

Для фиксирования графа необходимо вызвать команду Lockgraph из меню Edit и в ответ на запрос о подтверждении нажать Yes.

В отображения структуры в шаровом виде необходимо сменить способ представления структуры с графового на шаровое. Для этого из меню View необходимо вызвать команду Performance... и появившемся одноименном окне установить переключатель в группе View в положение Spheres. Ползунком Sphereradius задать желаемый радиус атомов-сфер.

В диалоговом окне Settings (Edit → Setparameters...) указать (либо с помощью кнопки Loadparameters... загрузите из файла Potential\_params.txt) параметры потенциалов, как показано на рис. 4

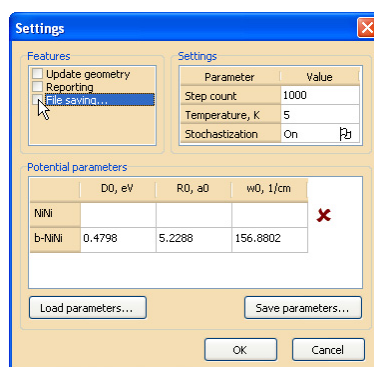


Рисунок 4. - Диалоговое окно выставления опций и параметров потенциалов

В данном диалоговом окне необходимо установить параметры в группе Settings, как показано на рис. 4и не закрывая окно Settings установить флажок Filesaving... в группе Features. При попытке установки флажка будет предложено указать путь и имя log-файла, в который будут заноситься данные расчета на каждой итерации вычислительной процедуры, для этого необходимо задать понятное имя файла (например, Ni172\_5K.log) и нажать кнопку Сохранить.

Для анализа распределения атомов до процесса эволюции необходимо привести радиальную функцию распределения атомов никеля в структуре (меню Analysis команда Radial distribution function)/

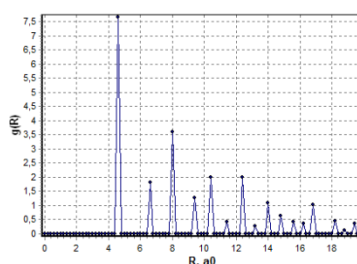


Рисунок 5. – Радиальная функция распределения атомов в кластере Ni<sub>172</sub> до процесса эволюции

Для осуществления одного прохода вычислительной процедуры, необходимо вызвать команду Optimization из меню Edit. Если этого окажется недостаточно для достижения ближней окрестности точки стационарного аттрактора (см. рис. 6), выполните расчет повторно.

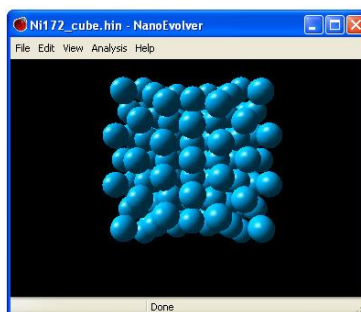


Рисунок 6. - Вид стационарного неравновесного аттрактора при  $T = 5$  К

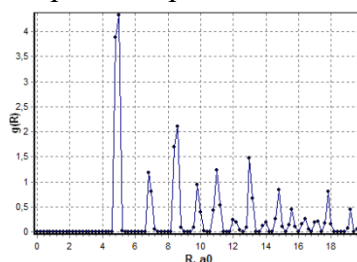


Рисунок 7. – Радиальная функция распределения атомов в кластере Ni<sub>172</sub> при  $T = 5$  К

Для открытия, сохраненного на диске log-файла в табличном процессоре Microsoft® Excel необходимо открыть окно Settings (Edit → Setparameters...). Выполнить двойной щелчок мышью по надписи Filesaving... (не по флажку, а именно по надписи), либо нажать Ctrl+Enter, установив фокус на данный пункт группы Features.

Поясим значение столбцов таблицы log-файла.

Step, nm — длина единичной трансляции изображающей точки в пространстве конфигураций наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры (нм);

E, kJ/mole — полная энергия связи наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры (кДж/моль);

$\|\text{grad } E\|$ , N — норма градиента полной энергии связи в текущем положении изображающей точки на поверхности потенциальной энергии (Н);

dt, s — квант времени жизни запутанного состояния квазиэлектронной системы (с).

RootSumSqr — технические данные.

SumSqr — технические данные.

Используя стандартные возможности табличного процессора MS Excel необходимо построить развертки эволюции нанокластера Ni<sub>172</sub> в координатах

1 энергия (E, кДж/моль) — время эволюции (t, пс)

- 2 энергия ( $E$ , кДж/моль) — путь изображающей точки ( $S$ , нм)
- 3 квант времени ( $\Delta t$ , фс) — время эволюции ( $t$ , пс)

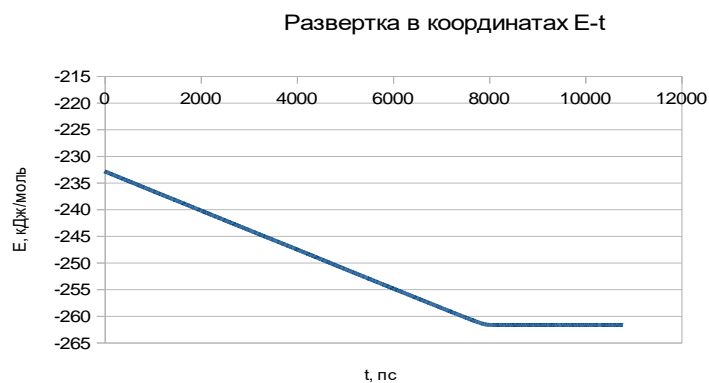


Рисунок 8 - Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 5 К в координатах E-t .

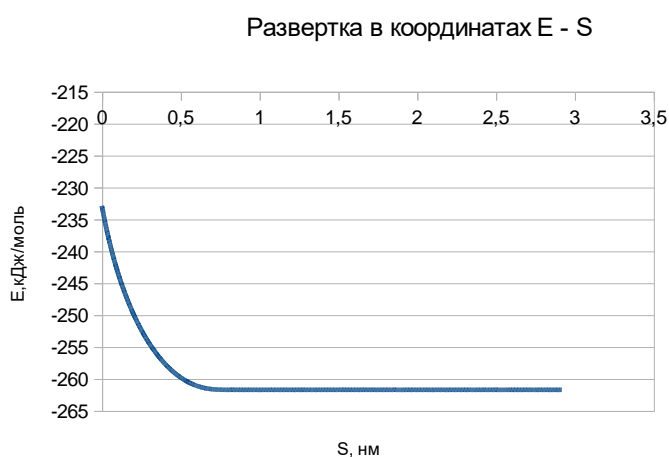


Рисунок 9 - Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 5 К в координатах E-S .

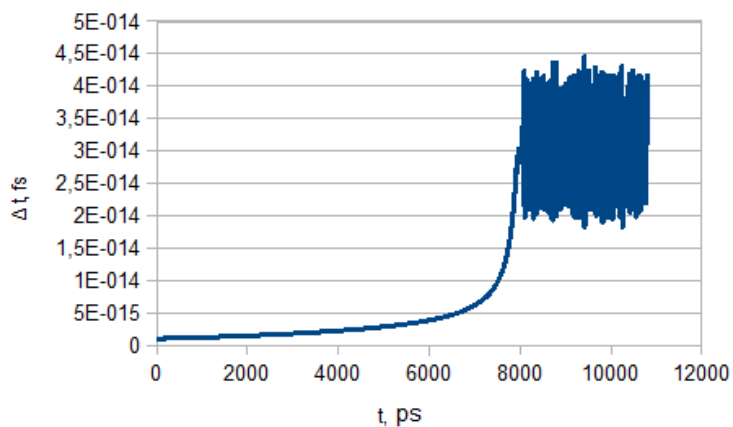


Рисунок 10 - Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 5 К в координатах  $\Delta t$ -t .

Аналогичные действия необходимо выполнить для случая температуры, близкой к комнатной (например,  $T = 300$  К).

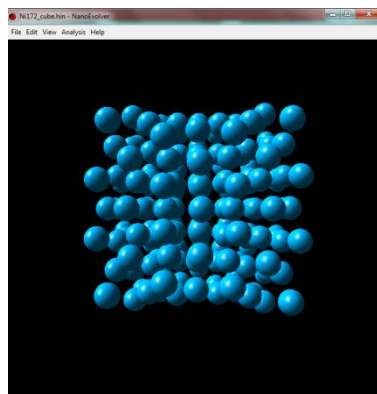


Рисунок 11. - Вид стационарного неравновесного аттрактора при  $T = 300$  К

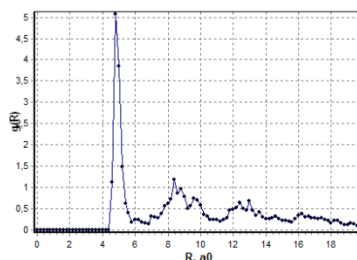


Рисунок 12. – Радиальная функция распределения атомов в кластере  $Ni_{172}$  при  $T = 300$  К

Результаты расчетов при  $T = 300$  К показаны на рис. 11-13.

Развертка в координатах  $E - t$

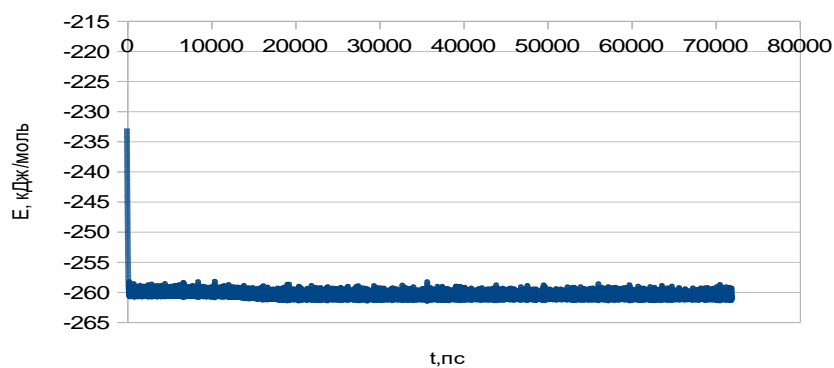


Рисунок 13- Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 300 К в координатах  $E-t$ .

Развертка в координатах  $E - S$

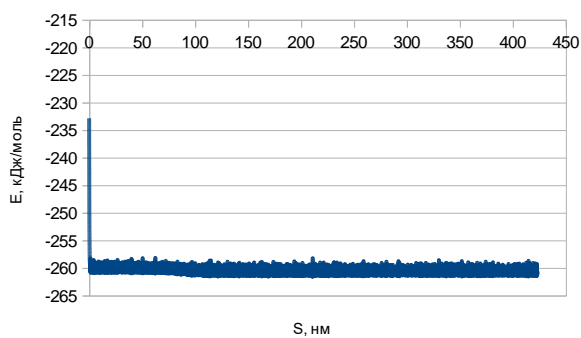


Рисунок 14 - Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 300 К в координатах  $E-S$ .

Развертка в координатах  $\Delta t - t$

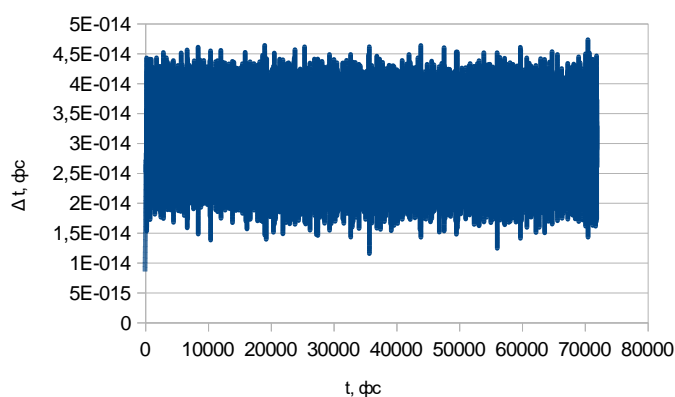


Рисунок 15- Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 300 К в координатах  $\Delta t - t$ .

### 2.3 Выводы

В ходе компьютерного эксперимента были получены кривые описывающие эволюционный процесс нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 5 К и 300 К. Полная энергия связи  $E$  на протяжении эволюционного процесса уменьшается до достижения стационарного состояния ( $t = 8000$  пс) при котором энергия остаётся постоянной. Квант времени  $\Delta t$  на протяжении эволюционного процесса сначала возрастал, а затем начинал флуктуировать около положения равновесия начиная с  $t = 8000$  пс. Суммарная длительность процесса достижения стационарного неравновесного аттрактора  $t = 8000$  пс. Среднее значение величины  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\langle \Delta t \rangle = 2,16 \cdot 10^{-14}$ . Размах девиаций относительно среднего : максимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 4,20 \cdot 10^{-14}$ , минимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 1,10 \cdot 10^{-15}$ . Полная энергия связи  $E$  на протяжении пути изображающего точки в пространстве конфигураций наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры  $S$  резко уменьшалась до достижения стационарного состояния, при котором  $E = -262$  кДж/моль.

Для случая температуры, близкой к комнатной (например,  $T = 300$  К) полная энергия связи  $E$  на протяжении эволюционного процесса уменьшается до достижения стационарного состояния, а затем начинал флуктуировать около положения равновесия ( $E = -260$  кДж/моль). Полная энергия связи  $E$  на протяжении пути изображающего точки в пространстве конфигураций наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры  $S$  резко уменьшалась до достижения стационарного состояния, а затем начинал флуктуировать около положения равновесия ( $E = -260$  кДж/моль). Среднее значение величины  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\langle \Delta t \rangle = 2,40 \cdot 10^{-14}$ . Размах девиаций относительно среднего : максимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 3,73 \cdot 10^{-14}$ , минимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 8,49 \cdot 10^{-15}$ .

### Библиографический список

1. Колачев, БА. Металловедение и термическая обработка цветных металлов и сплавов/ БА. Колачев, В.И. Елагин, ВА. Ливанов. — М.: МИСИС, 2005.-432 с.
2. Структура и свойства интерметалл ид ных материалов с нанофаз-ным упрочнением / Ю.Р. Колобов [и др.]; под ред. Е.Н. Каблова, Ю.Р. Колобова. - М.: МИСиС издательский дом, 2008. — 326 с.
3. Алюминиевые сплавы. Металловедение аноминия и его сплавов: справочное руководство/ А.И. Беляев [и др.). — М.: Металлургия, 1971.-352 с.
4. Диаграммы состояния двойных металлических систем : справочник. В 3 т. Т. 1 / под общ.ред. Н.П. Лякишева. - М.: Машиностроение, 1997.- 1024 с.



5. Поварова, К.Б. Принципы создания конструкционных сплавов на основе интерметаллидов. Ч. 1 / К.Б. Поварова, ОА. Банных // Материаловедение. — 1999. - № 2. — С. 27—33.
6. Поварова, К.Б. Принципы создания конструкционных сплавов на основе интерметаллидов. Ч. 2 / К.Б. Поварова, ОА. Банных // Материаловедение. - 1999. - № 3. - С. 29-37.
7. Сплавы на основе алюминидов никеля / В.П. Бунтушкин [и др.] // МиТОМ.- 1999. -№ 1.- С. 32-34.
8. Верин, А.С. Интерметаллид  $Ni_3Al$  как основа жаропрочного сплава / А.С. Верин // МиТОМ. - 1997. - № 5. - С. 26-28.
9. Chang tung-hun, Pan Yung-chuan. Untersuchungen zum Diffusionsverhalten einer Ni $\gamma$ -Legierung // Schweiss. UngSchneid. — 1992. — № 10. — С. 554-559.
10. Хлыстов Е.Н., Степанова Н.Н., Сазонова В. А., Родионов Д.П., Ларионов В.Н., Кашапов О.Р. Формирование структуры модифицированных монокристаллов  $\langle 001 \rangle$  жаропрочного никелевого сплава/ФММ. - 1992. - № 5. - С. 47-54.
11. Сазонова В.А., Акшенцев Ю.Н., Родионов Д.П., Виноградова Н.И., Степанова Н.Н. Микроструктура быстро закристаллизованных никелевых жаропрочных сплавов/ФММ. —1992 № 5 - С. 150-154.
12. Степанова Н.Н., Сазонова В.А., Родионов Д.П., Кашапов О.Р., Хлыстов Е.Н. Влияние параметров кристаллизации на совершенство монокристаллов никелевого жаропрочного сплава/ФММ. - 1994. - Т. 77. - Вып. 6. - С. 137-145.
13. Степанова Н.Н., Родионов Д.П., Сазонова В. А., Турхан Ю.Э. Высокотемпературное рентгеновское исследование монокристаллов  $\langle 001 \rangle$  никелевого жаропрочного сплава. Ч. 1/ФММ. - 1995. -Т. 80. -Вып. 6. -С. 74-82.
14. Степанова Н.Н., Родионов Д.П., Сазонова В.А., Турхан Ю.Э. Высокотемпературное рентгеновское исследование монокристаллов  $\langle 001 \rangle$  никелевого жаропрочного сплава. II. Нагрев в инертной и окислительной среде /ФММ. - 1997. - Т. 83. - Вып. 1. - С. 125-131.
15. Степанова Н.Н. Фазовые превращения в тройных интерметаллидах на основе  $Ni_3Al$  и жаропрочных никелевых сплавах и структура в монокристаллическом состоянии / автореф. дисс. на соиск уч. степени д.ф.-м.н. – Екатеринбург, 2004
16. Гринберг Б. А. Интерметаллиды  $Ni_3Al$  и  $TiAl$ : микроструктура, деформационное поведение / Б. А. Гринберг, М. А. Иванов. — Екатеринбург: УрО РАН, 2002. — 360 с.
17. Колобов Ю. Р. Структура и свойства интерметаллидных материалов с нанофазным упрочнением / [Ю. Р. Колобов, Е. Н. Каблов, Э. В. Козлов и др.] / Под ред. Е. Н. Каблова и Ю. Р. Колобова. — М. : Издательский Дом МИСиС, 2008. — 328 с.
18. Старенченко В. А. Термическое и деформационное упрочнение монокристаллов сплавов со сверхструктурой L12 / [В. А. Старенченко, Ю. В. Соловьева, С. В. Старенченко, Т. А. Ковалевская]. — Томск : Изд-во НТЛ, 2006. — 292 с.
19. Massalski T. V. Binary alloy phase diagrams. — Ohio, American Society for Metals: Metals. Park, 1986. — 1. — 1002 p.
20. Мильман Ю.В., Чугунова С.И., Гончарук В.А., Голубенко А.А., Ефимов Н.А., Гончарова И.В., Куприн В.В., Мордовец Н.М. Электронная микроскопия и прочность материалов, 2013. - №19 , С.78-85.
21. Ковтунов А.И. Интерметаллидные сплавы – Тольятти : Изд-во ТГУ, 2018.
22. Родионов Д.П., Филиппов Ю.И., Виноградова Н.И., Казанцева Н.В., Степанова Н.Н., Акшенцев Ю.Л., Давыдов Д.И. Высокотемпературная деформация монокристаллов сплавов на основе  $Ni_3Al$  // Деформация и разрушение материалов. 2009. № 8. С.31-37.
23. Структура сплавов на основе  $Ni_3Al$  после высокотемпературной деформации / автореф. дисс. на соиск уч. степени к.т.н.] – Екатеринбург, 2011

24. Beznosjuk S.A., Minaev B.F., Dajanov R.D., Muldachmetov Z.M. Approximating quasiparticle density functional calculations of small active clusters: strong electron correlation effects // Int. J. Quant. Chem. 1990. 38(6). 779—797.

## 6. Критерии оценивания

### Оценивание содержания отчета

4-балльная шкала	Показатели	Критерии
Отлично	1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 3. Своевременность и	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.
Хорошо	последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета. 4. Творческий подход студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета.	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, имеются отдельные недостатки в оформлении отчета по представленному материалу.
Удовлетворительно	5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.	Задание в целом выполнено, однако имеются недостатки при выполнении в ходе практики отдельных разделов (частей) задания, имеются замечания по оформлению собранного материала в отчете.
Неудовлетворительно		Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий

Утверждено:  
решением ученого совета Университета  
протокол № 6  
от «27» апреля 2021 г.

## **ПРОГРАММА**

**Производственной практики**

**Научно-исследовательская работа (4 семестр)**

**04.04.01 Химия**

*Профиль*

**«Квантовые технологии, компьютерный наноинжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»**

Форма обучения **очная**

Барнаул 2021 г.

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 4 от «01» июля 2021 г.

---

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 5 от «01» июля 2022 г.

---

## 1. Вид практики, способы (при наличии) и формы ее проведения

**Вид практики:** производственная практика.

**Тип практики:** научно-исследовательская работа

**Способы проведения (при наличии):** стационарная / выездная.

**Форма проведения практики:** дискретная по периодам проведения

## 2. Перечень планируемых результатов обучения при прохождении практики, соотнесённых с планируемыми результатами освоения ОПОП

### 2.1. Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Общепрофессиональные навыки	<p><b>ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.  <b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.  <b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p>
	<p><b>ОПК-2.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук</p>	<p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.  <b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.  <b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p>

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Компьютерная грамотность при решении задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.
Представление результатов профессиональной деятельности	<b>ОПК-4.</b> Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов	<b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы. <b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов. <b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР. <b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

## 2.2. Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения в области и (или) сфере профессиональной деятельности выпускников

Тип задачи профессиональной деятельности	Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
Научно-исследовательский	<b>ПК-1.</b> Способен осуществлять научно-исследовательские разработки в области новейших квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инженеринга и физикохимии	<b>ПК-1.1.</b> Знает теоретические основы и методологию квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инженеринга и физикохимии материалов. <b>ПК-1.2.</b> Умеет планировать этапы исследования по изучению наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами. <b>ПК-1.3.</b> Владеет навыками применения современного программного обеспечения при

	материалов	проведении разработок в области новейших квантовых технологий, компьютерного наноинжиниринга и физикохимии материалов. <b>ПК-1.4.</b> Умеет представлять результаты научно-исследовательских разработок с использованием ИКТ.
	<b>ПК-2.</b> Способен планировать и осуществлять научно-исследовательскую деятельность и выбирать методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии в составе научного коллектива.	<b>ПК-2.1.</b> Знает методы и методологию планирования научно-исследовательской деятельности в составе научного коллектива. <b>ПК-2.2.</b> Умеет составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий научно-исследовательской деятельности. <b>ПК-2.3.</b> Умеет применять расчетно-теоретические, экспериментальные методы и методики решения поставленных научно-исследовательских задач выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии. <b>ПК-2.4.</b> Умеет представлять результаты научно-исследовательских разработок с использованием ИКТ.
	<b>ПК-3.</b> Способен проводить обработку и анализ научно-технической информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии	<b>ПК-3.1.</b> Знает общие принципы обработки и анализа информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии. <b>ПК-3.2.</b> Умеет проводить поиск специализированной информации в научной литературе и информационных базах данных <b>ПК-3.3.</b> Умеет анализировать и обобщать результаты научно-исследовательской деятельности по тематике исследования в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии.

### 3. Место практики в структуре образовательной программы

Производственная практика (научно-исследовательская работа) относится к обязательной части блока 2 «Практика» основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП ВО) по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

### 4. Объем практики

Объем практики составляет 15 зачетных единицы (540 ч.) Продолжительность практики регламентируется графиком учебного процесса.

### 5. Порядок организации и содержание практики

Практика проходит в форме индивидуальной самостоятельной работы студентов под руководством руководителя от кафедры или профильных организаций.

Практика включает выполнение обучающимися ряда заданий, направленных на формирование требуемых компетенций, выполнение задач, определенных в индивидуальном задании на практику.

Содержание практики определяется кафедрой.

Практика начинается с установочного занятия (организационного собрания), на котором студенты знакомятся с целями и задачами практики, объемом и особенностями работ, требованиями к зачёту. Проводится инструктаж по технике безопасности.

<b>Разделы (этапы) практики</b>	<b>Виды работы на практике, включая самостоятельную работу студентов</b>	<b>Формы текущего контроля</b>
Организационный этап	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ (в АлтГУ и на месте прохождения практики).	Собеседование с руководителем практики
Основной этап	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ. Собеседование с руководителем практики Подготовка литературного обзора по теме исследования Освоение методов исследования	Индивидуальные задания
Заключительный этап	Подготовка отчета	Отчет по практике

#### **6. Формы отчетности по практике**

По завершению производственной практики (научно-исследовательская работа (4 семестр)) на кафедру сдаются: отчет по практике, в основе которого выполненное индивидуальное задание и характеристика с места прохождения практики (только в случае прохождения практики в профильных организациях), с обязательным указанием факта ознакомления с инструкциями по охране труда и технике безопасности.

#### **7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике**

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике приведен в приложении 1.

#### **8. Перечень учебной литературы и ресурсов сети «Интернет», необходимых для проведения практики**

а) основная литература:

1. Федеральным государственным образовательным стандартом по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» высшего образования, утвержденный приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 23.09.2015г. №1042
2. ГОСТ Р 7.0.5.-2008. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления. Введ. 2009-01-01. – М.: Стандартинформ, 2008. – 22 с. (<http://gostexpert.ru/gost/gost-7.0.5-2008>).

б) дополнительная литература:

1. Положение «О практической подготовке обучающихся в ФГБОУ ВО "Алтайский государственный университет».
2. Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет»

в) ресурсы сети «Интернет»

1. Поисковые системы (Google, Yandex и др.).
2. Реферативная база данных ВИНТИ РАН.



3. Реферативная база данных научной периодики «Scopus» (<http://www.scopus.com/>).
4. Реферативно-библиографическая база данных научной периодики «WebofScience» (<http://www.webofknowledge.com/>).
5. Сеть патентной информации Европейского патентного ведомства «Espacenet» (<http://worldwide.espacenet.com/>).
6. Библиотека ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет (<http://elibrary.asu.ru/>)
7. Электронно-библиотечная система Издательства Лань (<https://e.lanbook.com/>)
8. Электронно-библиотечная система Университетская библиотека on-line (<http://biblioclub.ru>)
9. Электронная библиотека Юрайт (<https://biblio-online.ru/>)

#### **9. Перечень информационных технологий, используемых при проведении практики, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

информационные технологии, позволяющие эффективно организовать самостоятельную работу, индивидуализировать процесс обучения, активизировать познавательную деятельность обучающихся.

1. Microsoft Windows 7 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная);
2. Microsoft Office 2010 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная)..

#### **10. Материально-техническая база, необходимая для проведения практики**

Для полноценного прохождения практики обеспечен доступ студенту к современной аппаратуре (лабораторным установкам, приборам (соответствующим требованиям проведения современных методов контроля и анализа веществ), коммуникационному оборудованию, компьютерной технике и др.), информационным системам, программным продуктам, базам данных и т.д., находящихся на базах практики и используемых студентом для выполнения индивидуальных заданий в рамках прохождения практики.

#### **11. Организация практики для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) и инвалидов**

Практика является обязательным разделом адаптированной образовательной программы. Она представляет собой вид учебных занятий, непосредственно ориентированных на профессионально практическую подготовку обучающихся, в том числе обеспечивающую подготовку и защиту выпускной квалификационной работы.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья форма проведения практики устанавливается с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

При определении мест прохождения практики обучающимся инвалидом образовательная организация учитывает рекомендации, данные по результатам медико-социальной экспертизы, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости для прохождения практики создаются специальные рабочие места в соответствии с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности.

Оснащение (оборудование) специальных рабочих мест для практики обучающихся инвалидов осуществляется индивидуально для конкретного инвалида, а также для группы инвалидов, имеющих однотипные нарушения функций организма и ограничения жизнедеятельности.

При необходимости для прохождения практики инвалидами создаются специальные рабочие места с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности в

соответствии с требованиями, утвержденными приказом Министерства труда России от 19 ноября 2013 года № 685н.

## **12. Методические рекомендации по организации и прохождению практики**

Перед прохождением практики обучающийся должен внимательно изучить программу практики и обратиться к соответствующим нормативным материалам с тем, чтобы быть подготовленным к выполнению поручений, данных руководителем практики. Обучающийся обязан:

1. Выполнить индивидуальный план прохождения практики и согласовать его с руководителем практики.
2. Соблюдать правила внутреннего распорядка предприятия, учреждения, организации, в которых он проходит практику.
3. Выполнять отдельные поручения руководителя практики, если это соответствует целям и задачам практики.
4. Не разглашать сведения, содержащие государственную, служебную, личную, семейную, коммерческую тайну, ставшие ему известными при прохождении практики.
5. Выполнять программу практики.
6. Подготовить материалы для отчета.
7. По окончании практики составить письменный отчет о прохождении практики и в установленный учебным планом срок защитить его.

Перед началом практики руководитель практики от кафедры проводит установочную конференцию, на которой обучающимся разъясняют порядок прохождения практики и ее содержание.

В период подготовки к практике и ее прохождении обучающийся:

- изучает необходимую научную литературу;
- по прибытии на место практики составляет индивидуальный план прохождения практики;
- строго соблюдает правила охраны труда и техники безопасности;
- поддерживает в установленные дни контакты с руководителем практики, а в случае возникновения непредвиденных обстоятельств или неясностей сообщает о них незамедлительно;
- реализует плановые мероприятия, предусмотренные программой практики;
- собирает и обобщает материалы, необходимые для подготовки отчета по практике;
- составляет отчет о проделанной работе и представляет его преподавателю-руководителю для подведения итогов практики.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

ФОНД  
ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ


по производственной практике  
научно-исследовательская работа (4 семестр)

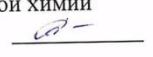
04.04.01 Химия

Профиль

**«Квантовые технологии, компьютерный наноинжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»**

Разработчики:

Зав. кафедрой физической и  
неорганической химии  
/С.А. Безносюк/ 

Доцент кафедры физической  
и неорганической химии  
/О.А. Маслова/ 

Барнаул 2021

## ПАСПОРТ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 1. Перечень формируемых компетенций:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения

ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-4. Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов

ПК-1. Способен осуществлять научно-исследовательские разработки в области новейших квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инжиниринга и физикохимии материалов

ПК-2. Способен планировать и осуществлять научно-исследовательскую деятельность и выбирать методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии в составе научного коллектива.

ПК-3. Способен проводить обработку и анализ научно-технической информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии

### 2. Планируемые результаты освоения дисциплины (модуля) / практики:

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины (модуля) / Контролируемые элементы практики	Код контролируемой компетенции (или её части)	Код и наименование индикатора достижения (только для ФГОС3++)	Наименование оценочного средства
1	2	3	4	5
1	Организационный этап	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4 ПК-1 ПК-2 ПК-3	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов</p>	Индивидуальные задания

			<p>полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
2	Основной этап	<p>ОПК-1</p> <p>ОПК-2</p> <p>ОПК-3</p> <p>ОПК-4</p> <p>ПК-1</p> <p>ПК-2</p> <p>ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз</p>	Индивидуальные задания

			<p>данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
3	Заключительный этап	<p>ОПК-1</p> <p>ОПК-2</p> <p>ОПК-3</p> <p>ОПК-4</p> <p>ПК-1</p> <p>ПК-2</p> <p>ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач</p>	Индивидуальные задания

			<p>в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
	Промежуточная аттестация по практике -	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3	<b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.	отчет

	<p>дифференцированный зачет</p>	<p>ОПК-4 ПК-1 ПК-2 ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на</p>	
--	---------------------------------	-----------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--



			текущих занятиях и других видах учебной деятельности.	
--	--	--	-------------------------------------------------------	--

### 3. Типовые оценочные средства, необходимые для оценки планируемых результатов обучения по практике:

#### ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ ПО ПРАКТИКЕ

**Оценочное средство-1:** индивидуальное задание.

**1. Цель:** выполнение научно-исследовательской работы, освоение методик исследования

**2. Контролируемый раздел дисциплины (модуля):** Организационный этап, основной этап.

**3. Проверяемые компетенции (код):** ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ПК-1, ПК-2, ПК-3

**4. Индикаторы достижения:**

ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.1. Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.2. Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.

ОПК-2.3. Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

-3.1. Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ОПК-4.1. Знает методы и методологию представления результатов научной работы.

ОПК-4.2. Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.

ОПК-4.3. Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.

ОПК-4.4. Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

**5. Пример оценочного средства:**

Выполнение отчета по индивидуальным заданиям

10. Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ. Собеседование с руководителем практики

11. Выбор направления научного исследования (1 семестр)

12. Подготовка библиографического списка по теме исследования

13. Освоение и применение освоенных методов исследования

**6. Критерии оценивания**

#### Оценивание содержания отчета

4-балльная шкала	Показатели	Критерии
Отлично	1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий

	отчете. 2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 3. Своевременность и	подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.
Хорошо	последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета. 4. Творческий подход	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, имеются отдельные недостатки в оформлении отчета по представленному материалу.
Удовлетворительно	студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета. 5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.	Задание в целом выполнено, однако имеются недостатки при выполнении в ходе практики отдельных разделов (частей) задания, имеются замечания по оформлению собранного материала в отчете.
Неудовлетворительно		Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.

**7. Рекомендуемый перечень вопросов для самостоятельной подготовки:**

4. Выбор направления научного исследования (1 семестр)
5. Состояние вопроса актуальности темы исследования
6. Освоенные методы исследования

**ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ПРАКТИКЕ**

1. Форма проведения промежуточной аттестации: дифференцированный зачет (зачет с оценкой).
2. Процедура проведения: аттестация по итогам практики проводится на основании оформленного в соответствии с требованиями, установленными программой практики отчета по практике, в котором руководителем практики выставляется оценка. По итогам аттестации выставляется дифференцированный зачет (зачет с оценкой).

**КИМ (контрольно-измерительные материалы) включают:**

письменный отчет по практике.

**3. Проверяемые компетенции (код):** ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ПК-1, ПК-2, ПК-3

**4. Индикаторы достижения:**

ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.1. Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.2. Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.

ОПК-2.3. Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

-3.1. Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ОПК-4.1. Знает методы и методологию представления результатов научной работы.

ОПК-4.2. Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.

ОПК-4.3. Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.

ОПК-4.4. Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

### **5. Пример оценочного средства:**

В отчете по учебной практике отражается проделанная студентом работа по заданиям, приведенным в программе практики. Отчет оформляется согласно требованиям и сдается на кафедру в печатном виде. Отчет студента по практике состоит из титульного листа, листа с заданием и непосредственно, отчета. Титульный лист является первой страницей отчета и служит источником информации об авторе, руководителях практики, месте и времени написания отчета. Лист с заданием содержит индивидуальные задания и сроки их выполнения. В отчете студент приводит результаты прохождения практики согласно индивидуальным заданиям.

### **Пример отчета:**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

#### **ОТЧЕТ**

о прохождении производственной практики  
(научно-исследовательская работа)

Выполнил(а) студент(ка)

\_\_\_\_ курса, \_\_\_\_ группы

Направление подготовки 04.04.01 Химия

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Руководитель практики

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Оценка \_\_\_\_\_

(дата сдачи отчета)

БАРНАУЛ 20\_\_

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии  
ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ  
на производственную практику  
(научно-исследовательская работа)

Студент \_\_\_\_\_  
Курс \_\_\_\_\_ группа \_\_\_\_\_ направление подготовки 04.04.01 Химия \_\_\_\_\_  
Направленность (профиль) \_\_\_\_\_  
Сроки прохождения практики \_\_\_\_\_  
Место прохождения практики \_\_\_\_\_

№ п/п	Содержание индивидуальных заданий	Рабочий график (план) выполнения
	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ. Собеседование с руководителем практики	
	Выбор направления научного исследования	
	Подготовка литературного обзора по теме «Интерметаллиды состава никель-алюминий»	
	Освоение метода молекулярной механики и квантовой нанокинетики	
	Оформление отчета	
	Сдача отчета	

Руководитель практики \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

**1 Композиционные материалы на основе никеля-алюминия.**

В промышленности в качестве конструкционных материалов все шире применяются интерметаллиды. Интерметаллид - это химическое соединение, образованное двумя или более металлами. Интерметаллиды имеют фиксированное соотношение между компонентами. Для интерметаллидов характерна преимущественно металлическая связь между атомами в решетке, однако существуют интерметаллиды с ионным и ковалентным типами химической связи, а также промежуточные случаи (ионно-металлическая и ковалентно-металлическая связь).

Интерметаллиды обладают, как правило, высокой твердостью и высокой химической стойкостью. Очень часто интерметаллиды имеют более высокую температуру

плавления, чем исходные металлы. Интерметаллиды менее пластичны, чем исходные металлы, и сообщают повышенную хрупкость сплавам, в структуру которых они входят, так как связь между атомами в решетке в них является переходной от металлической к ковалентной или ионной.

Высокая хрупкость многих интерметаллидов, особенно при комнатной температуре, ограничивает их область применения. Однако интерметаллидные сплавы могут успешно применяться для формирования поверхностных слоев деталей, от которых требуются повышенные эксплуатационные свойства (износостойкость, жаростойкость, коррозионная стойкость).

### **1.1 Свойства и область применения интерметаллидных сплавов**

Интерметаллическими соединениями, или интерметаллидами, называют соединения металлов между собой, причем к компонентам интерметаллидов относят также и полуметаллы - кремний и германий. Самая общая классификация интерметаллидов включает дальтони́ды, бертоллиды и фазы Курнакова [1].

К настоящему времени обнаружено и описано более 1500 интерметаллических соединений, которые образуют около 200 различных типов кристаллических структур [2].

Наибольший практический интерес представляют алюминиды и сплавы на их основе, что обусловлено следующими причинами:

а) алюминиды и сплавы на их основе обладают высокими прочностными и жаропрочными характеристиками при рабочих температурах, свойственных никелевым сплавам и выше них (при меньшей плотности) [3];

б) алюминий существенно понижает плотность сплавов. Так, в частности, плотность интерметаллида  $TiAl$  в 2,5 раза меньше, чем у жаропрочных никелевых сплавов. Пониженная плотность алюминидов способствует повышению удельных характеристик прочности и жаропрочности. Заметим, что в последнее время большое внимание уделяется одному из самых легких интерметаллидов  $MgSi$  ( $1,94 \text{ г/м}^3$ ) [4];

в) по сравнению с другими материалами алюминиды обладают высоким сопротивлением окислению. Одним из лучших материалов в этом отношении является интерметаллид  $FeAl$ , обладающий к тому же и высокой коррозионной стойкостью. Высокой жаростойкостью обладают также силициды, но для них труднее решается проблема устранения их хрупкости;

г) алюминий относится к сравнительно недорогим, недефицитным легирующим элементам [5].

Основные факторы, затрудняющие применение интерметаллидов и сплавов на их основе как конструкционных материалов, следующие: свойственная интерметаллидам хрупкость, особенно при комнатной температуре; недостаточное в некоторых случаях сопротивление окислению; ненадежность методов проектирования и предсказания длительности эксплуатации изделий из интерметаллидов; отсутствие поставщиков качественной продукции из интерметаллидов; высокая стоимость изделий.

Способы повышения пластичности интерметаллидов включают микролегирование, легирование, формирование оптимальной микроструктуры, повышение чистоты исходных материалов [6].

Микролегирование обычно проводится не только с целью повышения пластичности, но и улучшения всего комплекса эксплуатационных свойств. Повышение пластичности при микролегировании может быть достигнуто в результате уменьшения ковалентной составляющей связи, создания благоприятной дислокационной структуры с более высокой подвижностью дислокаций, обеспечения действия более благоприятных систем скольжения, изменения кристаллического или фазового состава и структурного состояния.

К новым направлениям легирования следует отнести упрочнение интерметаллидов дисперсными частицами. Дисперсное упрочнение, реализуемое методами порошковой металлургии, обеспечивают оксиды.

Большое значение имеет также чистота исходных материалов, особенно по легкоплавким примесям, сегрегация которых на границах зерен вызывает хрупкое межзеренное разрушение.

Интерметаллиды уже давно применяют в технике для различных назначений. Хорошо известно применение алюминидов и силицидов в качестве защитных покрытий при горячем деформировании и термической обработке химически активных металлов. Интерметаллиды составляют основу сплавов - накопителей водорода, легко поглощающих большие количества водорода при температурах, близких к комнатной, и отдающих его при невысоком нагреве при понижении его давления [7].

Большое значение имеет также чистота исходных материалов, особенно по легкоплавким примесям, сегрегация которых на границах зерен вызывает хрупкое межзеренное разрушение.

Интерметаллиды уже давно применяют в технике для различных назначений. Хорошо известно применение алюминидов и силицидов в качестве защитных покрытий при горячем деформировании и термической обработке химически активных металлов. Интерметаллиды составляют основу сплавов - накопителей водорода, легко поглощающих большие количества водорода при температурах, близких к комнатной, и отдающих его при невысоком нагреве при понижении его давления [8].

Сплавы на основе алюминидов широко применяются в качестве покрытий. Наиболее применимы покрытия на основе интерметаллидных фаз  $Ni_3Al$  и  $NiAl$ . Эти покрытия работают в условиях высоких температур и в окислительных средах [9].

### **1.2 Интерметаллидные сплавы на основе алюминидов никеля.**

Интерметаллическое соединение  $Ni_3Al$  ( $\gamma'$ -фаза) является основной упрочняющей фазой современных никелевых жаропрочных сплавов [10]. Особенностью этого соединения являются температурные аномалии его деформационных характеристик и связанный с ними эффект термического упрочнения. Благодаря этому исследуемый сплав имеет важное практическое значение. Основное направление исследований сплавов на основе  $Ni_3Al$ , как правило, связано с их механическими свойствами.

Изучению физических свойств соединения  $Ni_3Al$ , особенно в условиях легирования, уделялось меньше внимания, в то же время такое исследование представляет несомненный интерес.

Соединение  $Ni_3Al$  существует в узком интервале концентраций вблизи 75 ат. % Ni [10]. Характерной особенностью его является способность растворять практически все переходные элементы. Известно, что каждый легирующий элемент имеет свой тип замещения. Многочисленные экспериментальные данные [11] позволяют утверждать, что атомы Nb, Ti, V, W будут преимущественно замещать позиции алюминия, атомы Co входят в подрешетку никеля. Такие элементы, как Fe и Cr, могут в равной мере замещать как позиции никеля, так и позиции алюминия.

В настоящее время диаграммы состояния тройных сплавов на основе  $Ni_3Al$  построены в виде отдельных разрезов, как правило, изотермических [10, 12-15].

#### **1.2.1 Состав, структура и свойства алюминидов никеля.**

Фаза  $Ni_3Al$  является основой для создания суперсплавов нового поколения на никелевой основе [16 - 18]. Фаза со сверхструктурой  $L1_2$  на основе  $Ni_3Al$  обозначается как  $\gamma'$ -фаза, в отличие от неупорядоченного твердого раствора с ближним атомным порядком состава Ni—Al, который обозначается как  $\gamma$ -фаза (рис. 1). В  $\gamma'$ -фазе наблюдается аномальная температурная зависимость механических свойств [16].

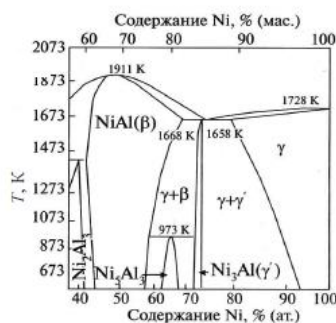


Рисунок 1. – Фрагмент фазовой диаграммы Al-Ni [19]

В современных жаропрочных никелевых сплавах эта аномалия проявляется в виде повышения предела текучести с ростом температуры в определенном температурном интервале. Такое поведение наблюдается исключительно в сплавах с дальним атомным порядком, то есть со сверхструктурой. Сверхструктура  $L1_2$  ( $\gamma'$ -фаза) (рисунок 2) реализуется при комнатной температуре в интервале концентраций 22,3—27% (ат.) Al. С увеличением температуры концентрационная область существования  $\gamma'$ -фазы уменьшается.

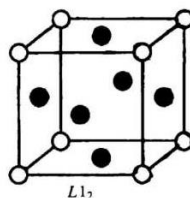


Рисунок 2. – Сверхструктура  $L1_2$ .

Развитие работ по созданию суперсплавов на никелевой основе привело к постепенному перемещению их составов вдоль двухфазной области ( $\gamma + \gamma'$ ) от незначительного содержания  $\gamma'$ -фазы к почти полному доминированию ее в объеме сплава [17]. В последние 20 лет область концентраций меньше 75% (ат.) Ni является основой для поиска новых суперсплавов.

Авторами монографии [17] показано, что как в самой простой форме  $A_3B$  ( $Ni_3Al$ ), так и в сложной  $A_3(BC)$ , например  $Ni_3(AlTi)$ , и в еще более сложных вариантах  $Ni_3(AlTiHf)$  свойства фазы  $Ni_3Al$  во многом определяют механическое поведение никелевых суперсплавов в широком температурном интервале.

В целом, при разработке жаропрочных сплавов необходимо обеспечивать баланс между жаростойкостью и механическими свойствами сплавов (твёрдостью, прочностью, пластичностью), что достигается комплексным легированием и оптимальной термомеханической обработкой.

В работе [20] в широком температурном интервале исследовано механическое поведение интерметаллида  $Ni_3Al$ , полученного методом быстрой закалки из жидкого состояния.

Согласно диаграмме состояния в сплавах системы Al-Ni образуется пять соединений:  $Al_3Ni$ ,  $Al_3Ni_2$ ,  $AlNi$  ( $\beta'$ ),  $AlNi_3$  ( $\alpha'$ ),  $Al_3Ni_5$ . Соединение  $Al_3Ni$  имеет постоянный состав, остальные соединения - существенные области гомогенности [4].

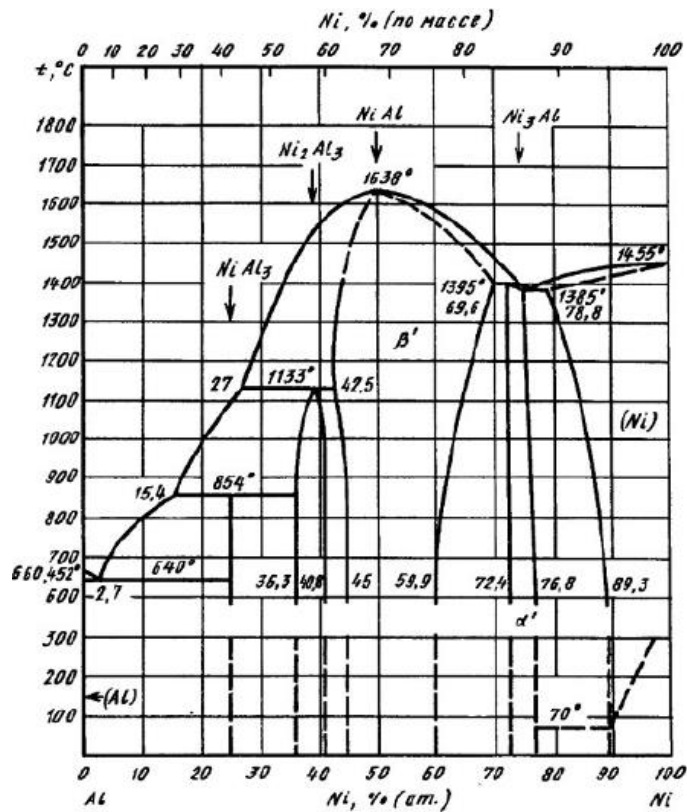


Рисунок 3. Диаграмма состояния Al-Ni

Из алюминидов никеля наибольший интерес как жаропрочные материалы представляют интерметаллиды  $Ni_3Al$  и  $NiAl$  (рис.1) обладающие при сравнительно небольшой плотности достаточно высокими характеристиками жаропрочности и жаростойкости [1].

Одна из задач легирования алюминидов  $Ni_3Al$  заключается в повышении его низкотемпературной пластичности и уменьшении склонности к межзеренному разрушению. Эта цель достигается легированием  $Ni_3Al$  такими элементами как В, Zr, Hf, Cr, Mn, Fe, Co, Si. Пластичность алюминидов никеля возрастает в результате уменьшения при легировании энергии активации термически активируемых дислокационных процессов и увеличения числа действующих систем скольжения.

### 1.2.2 Свойства наплавленных сплавов на основе алюминидов никеля.

Одним из способов формирования интерметаллидных покрытий системы никель-алюминий является наплавка.

Интерметаллидные сплавы системы никель-алюминий на основе фаз  $Ni_3Al$  и  $NiAl$  отличаются высокой жаростойкостью и могут успешно применяться для формирования постоянных кокильных покрытий для литья алюминидовых сплавов.

Механические и эксплуатационные свойства покрытия определяются прежде всего химическим и фазовым составом наплавленного металла. С повышением содержания алюминия твердость наплавленного металла увеличивается, что связано с увеличением доли твердых интерметаллидных фаз ( $NiAl$  и  $\gamma'$ ) в структуре покрытия [21].

### 1.2.3 Применение сплавов на основе алюминидов никеля.

Интерметаллическое соединение  $Ni_3Al$  со сверхструктурой типа  $L1_2$  является основной упрочняющей фазой жаропрочных никелевых сплавов, представляющих важную группу высокопрочных материалов. Эти сплавы применяются для изготовления турбинных лопаток, ответственных и наиболее нагруженных деталей авиационных и стационарных газотурбинных установок [22]. В настоящее время большое внимание уделяется увеличению мощности и к.п.д. газотурбинных установок, что обеспечивается значительным повышением температуры эксплуатации и рабочих напряжений. При этом для турбинных лопаток, работающих в форсированном режиме, используются те же



сплавы, что и при стандартных режимах без замены их на более жаропрочные и дорогостоящие. Сплавы при этом оказываются в экстремальных условиях по температуре и уровню напряжений. С этой точки зрения актуальной задачей является изучение механизмов деформации сплавов на основе  $Ni_3Al$  с целью оценки стабильности структурного состояния в условиях высокотемпературного нагружения [23].

Укажем некоторые приложения сплавов  $Ni_3Al$ :

- turbocharger роторы для дизельных двигателей. Сложнолегированные алюминиды (например состава  $Ni - 15,9Al - 8,0Cr - 0,8Mo - 1,0Zr - 0,03B$ ) обладают хорошими литейными качествами и усталостными свойствами, благодаря чему они могут заменить используемые обычно суперсплавы, такие как IN—713С;

- высокотемпературные штампы и формы. Хорошая стойкость к окислению при высоких температурах и высокая прочность при большой скорости деформации делают сплавы  $Ni_3Al$  привлекательными как материалы для горячей штамповки и как формы для выплавки стекла;

- зажимные приспособления в высокотемпературных печах. Благодаря стойкости к образованию карбидов и оксидов, сплавы  $Ni_3Al$  могут быть использованы в качестве крепления при термообработке деталей автомобилей;

- роллеры для прокатки стальных слэбов. Высокотемпературная прочность, стойкость к окислению и коррозии сплавов  $Ni_3Al$  существенно уменьшают энергетические затраты (поскольку не требуется водяное охлаждение) и затраты на материалы, так как значительно увеличивается время эксплуатации;

- гидротурбины. Возможность использования алюминидов никеля для роторов гидротурбин обусловлена тем, что сплавы  $Ni_3Al$  обладают высоким сопротивлением к вибрационной кавитации в воде;

- режущий инструмент. Композиты вольфрам—карбид с покрытием из алюминидов никеля обладают большей прочностью (как при низких, так и при высоких температурах) и лучшими режущими свойствами, чем те же композиты с покрытием из кобальта;

- лопатки турбин для реактивных двигателей. Полученные путем направленной кристаллизации сложнолегированные сплавы  $Ni_3Al$ , например состава ( $Ni - 16,3Al - 8,2Mo - 0,26B$ ), обладают высокой прочностью и сопротивлением крипу при температурах выше  $1000\text{ }^\circ\text{C}$  в окисляющей атмосфере.

## **2 Метод квантовой нанокинетики при моделировании НЭМС**

### **2.1 Теоретическое введение**

Известно, что химические реакции в молекулах и в материалах, как реакции разрыва и образования химических связей атомов, происходят за счет сдвига ядер. Быстрота движения ядер характеризуется периодами их колебаний относительно положений равновесия. Реакция не может происходить за времена меньшие, чем периоды колебания ядер, поэтому они задают характерный «квант» времени химических реакций в веществе. Полное время протекания типичных элементарных химических реакций во всех веществах лежит в пределах  $10\text{--}10^4$  фс. Они делятся на протяжении от одного до сотен периодов колебания ядер.

Для изучения быстрых актов реакционных процессов с конца 1980-х годов применяется фемтосекундная лазерная спектроскопия, использующая временное сжатие лазерных световых импульсов. У истоков данного направления, получившего название «Фемтохимия», стоит имя Ахмеда Зевейла, получившего в 1999 г. Нобелевскую премию по химии за исследования в области фемтосекундной спектроскопии. К тому времени в исследовании химических процессов был достигнут нижний временной предел сжатия лазерных импульсов, составлявший 4 фс.

Считается, что дальше укорачивать импульсы бессмысленно, так как даже самые быстрые элементарные химические реакции делятся больше, чем 10 фс. Предполагается, что кроме химических реакций причин дискретизации кинетики процессов в веществе

нет. Так как в отсутствие химических реакций движение системы атомов и их связей описывается непрерывной эволюцией, то они теоретически исследуются компьютерным моделированием в соответствии с законами непрерывной молекулярной динамики. Однако в конце 90-х годов в рамках квантово-полевых концепций (термополевая динамика, квантово-полевая химия) конденсированного состояния были предсказаны полевые эффекты дискретизации эволюции плазмы электронов в наноструктурах вещества и в отсутствие химических реакций. Эффекты дополнительной дискретности кинетики наноструктурных процессов связаны с наличием в полевых плазменных системах кроме элементарных квантовых частиц ещё и временно-живущих составных квантовых частиц — компактонов (роевых пар электронов, электронов и антиэлектронов, их троек, четверок и т. д.). Теория компактонов была рассмотрена в одной из первых публикации по основам квантово-полевой химии в начале 90-х годов [24].

## 2.2 Методика выполнения компьютерного эксперимента.

Запустите программу «NanoEvolver» — Dissipative перед началом выполнения компьютерного эксперимента.

Из внешнего файла необходимо запустить модель структуры кубического кластера никеля  $Ni_{172}$  (File → Loadstructure...).

Затем, вызвать команду Graph... из меню View. Задать радиус обрезки, заведомо превышающий расстояние между наиболее удаленными атомами в структуре, например,  $1000000 a_0$ . Для этого в поле Maximum введите 1000000, затем введите 1000000 в поле Exactvalue и обязательно нажать Enter для применения изменений. При этом в главном окне должен отрисоваться полный граф наноструктуры. Далее следует закрыть окно Graph нажатием кнопки ОК.

Для фиксирования графа необходимо вызвать команду Lockgraph из меню Edit и в ответ на запрос о подтверждении нажать Yes.

В отображения структуры в шаровом виде необходимо сменить способ представления структуры с графового на шаровое. Для этого из меню View необходимо вызвать команду Performance... и появившемся одноименном окне установить переключатель в группе View в положение Spheres. Ползунком Sphereradius задать желаемый радиус атомов-сфер.

В диалоговом окне Settings (Edit → Setparameters...) указать (либо с помощью кнопки Loadparameters... загрузите из файла Potential\_params.txt) параметры потенциалов, как показано на рис. 4

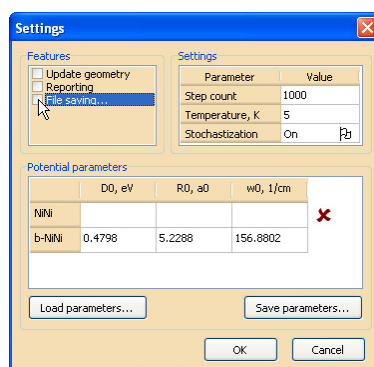


Рисунок 4. - Диалоговое окно выставления опций и параметров потенциалов

В данном диалоговом окне необходимо установить параметры в группе Settings, как показано на рис. 4и не закрывая окно Settings установить флажок Filesaving... в группе Features. При попытке установки флажка будет предложено указать путь и имя log-файла, в который будут заноситься данные расчета на каждой итерации вычислительной процедуры, для этого необходимо задать понятное имя файла (например, Ni172\_5K.log) и нажать кнопку Сохранить.

Для анализа распределения атомов до процесса эволюции необходимо привести радиальную функцию распределения атомов никеля в структуре (меню Analysis команда Radial distribution function)/

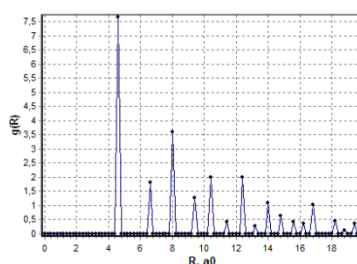


Рисунок 5. – Радиальная функция распределения атомов в кластере Ni<sub>172</sub> до процесса эволюции

Для осуществления одного прохода вычислительной процедуры, необходимо вызвать команду Optimization из меню Edit. Если этого окажется недостаточно для достижения ближней окрестности точки стационарного аттрактора (см. рис. 6), выполните расчет повторно.

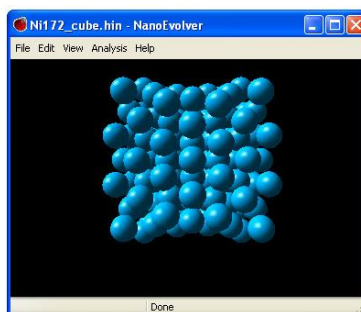


Рисунок 6. - Вид стационарного неравновесного аттрактора при  $T = 5$  К

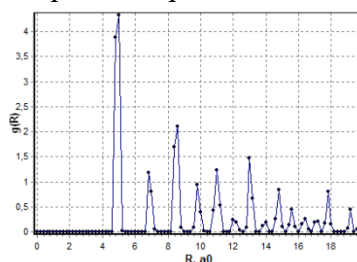


Рисунок 7. – Радиальная функция распределения атомов в кластере Ni<sub>172</sub> при  $T = 5$  К

Для открытия, сохраненного на диске log-файла в табличном процессоре Microsoft® Excel необходимо открыть окно Settings (Edit → Setparameters...). Выполнить двойной щелчок мышью по надписи Filesaving... (не по флажку, а именно по надписи), либо нажать Ctrl+Enter, установив фокус на данный пункт группы Features.

Поясим значение столбцов таблицы log-файла.

Step, nm — длина единичной трансляции изображающей точки в пространстве конфигураций наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры (нм);

E, kJ/mole — полная энергия связи наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры (кДж/моль);

$\|\text{grad } E\|$ , N — норма градиента полной энергии связи в текущем положении изображающей точки на поверхности потенциальной энергии (Н);

dt, s — квант времени жизни запутанного состояния квазиэлектронной системы (с).

RootSumSqr — технические данные.

SumSqr — технические данные.

Используя стандартные возможности табличного процессора MS Excel необходимо построить развертки эволюции нанокластера Ni<sub>172</sub> в координатах

4 энергия (E, кДж/моль) — время эволюции (t, пс)

- 5 энергия ( $E$ , кДж/моль) — путь изображающей точки ( $S$ , нм)  
 6 квант времени ( $\Delta t$ , фс) — время эволюции ( $t$ , пс)

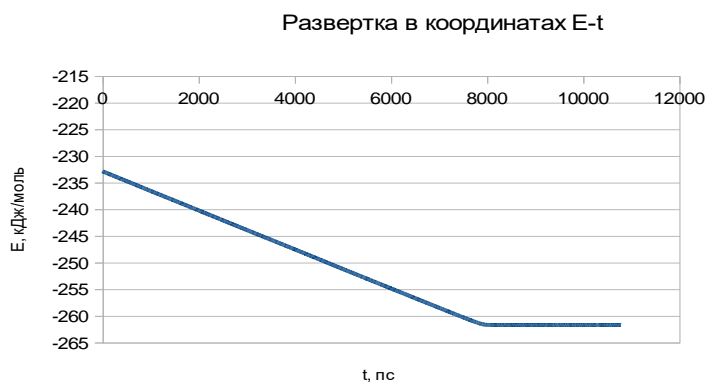


Рисунок 8 - Развертка эволюции нанокластера  $\text{Ni}_{172}$  при температуре 5 К в координатах E-t .

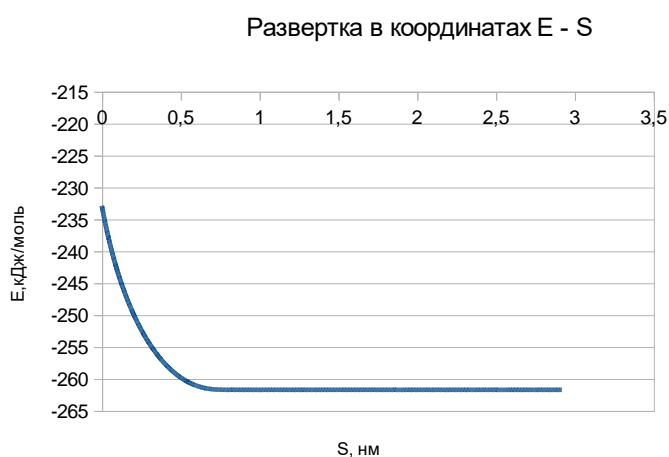


Рисунок 9 - Развертка эволюции нанокластера  $\text{Ni}_{172}$  при температуре 5 К в координатах E-S .

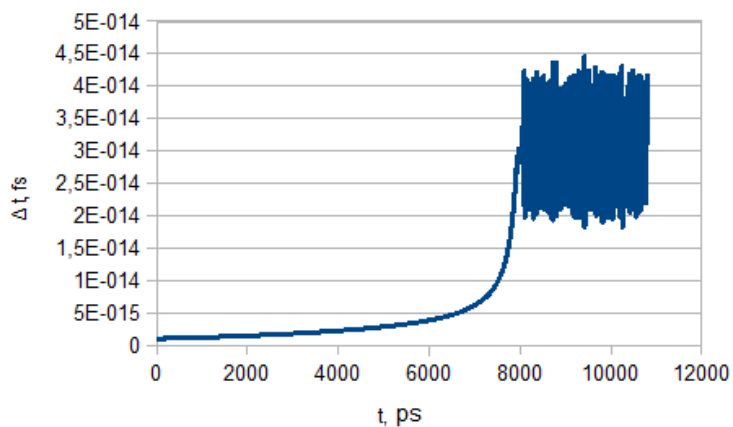


Рисунок 10 - Развертка эволюции нанокластера  $\text{Ni}_{172}$  при температуре 5 К в координатах  $\Delta t$ -t .

Аналогичные действия необходимо выполнить для случая температуры, близкой к комнатной (например,  $T = 300$  К).

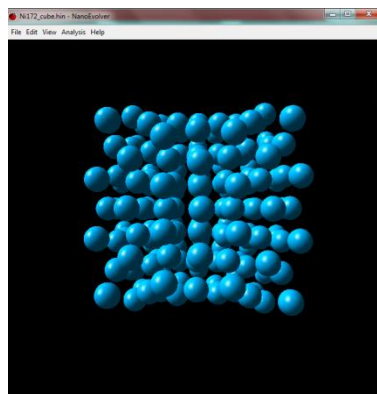


Рисунок 11. - Вид стационарного неравновесного аттрактора при  $T = 300$  К

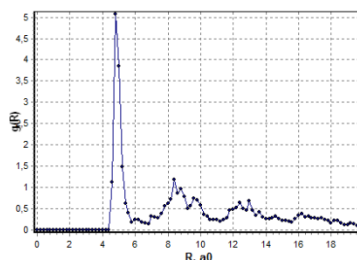


Рисунок 12. – Радиальная функция распределения атомов в кластере  $Ni_{172}$  при  $T = 300$  К

Результаты расчетов при  $T = 300$  К показаны на рис. 11-13.

Развертка в координатах  $E - t$

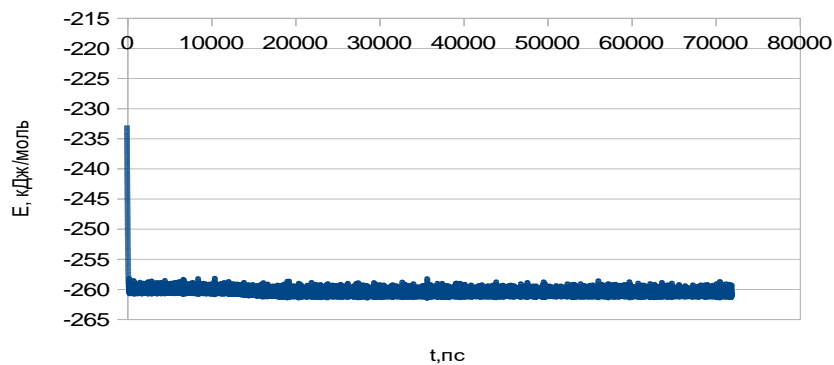


Рисунок 13- Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 300 К в координатах  $E-t$ .

Развертка в координатах  $E - S$

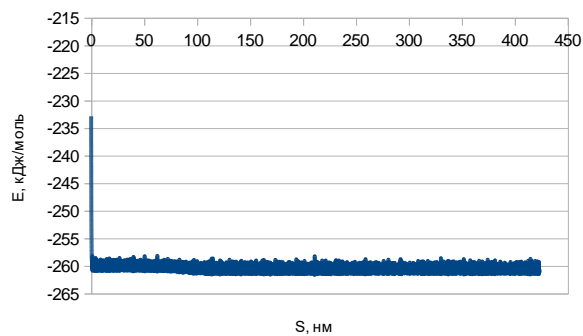


Рисунок 14 - Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 300 К в координатах  $E-S$ .

Развертка в координатах  $\Delta t - t$

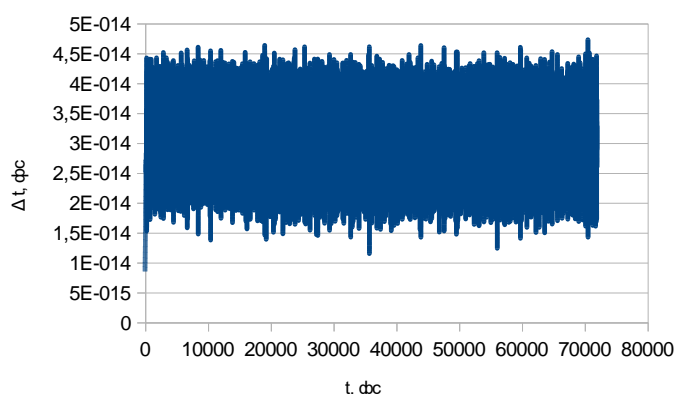


Рисунок 15- Развертка эволюции нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 300 К в координатах  $\Delta t - t$ .

### 2.3 Выводы

В ходе компьютерного эксперимента были получены кривые описывающие эволюционный процесс нанокластера  $Ni_{172}$  при температуре 5 К и 300 К. Полная энергия связи  $E$  на протяжении эволюционного процесса уменьшается до достижения стационарного состояния ( $t = 8000$  пс) при котором энергия остаётся постоянной. Квант времени  $\Delta t$  на протяжении эволюционного процесса сначала возрастал, а затем начинал флуктуировать около положения равновесия начиная с  $t = 8000$  пс. Суммарная длительность процесса достижения стационарного неравновесного аттрактора  $t = 8000$  пс. Среднее значение величины  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\langle \Delta t \rangle = 2,16 \cdot 10^{-14}$ . Размах девиаций относительно среднего : максимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 4,20 \cdot 10^{-14}$ , минимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 1,10 \cdot 10^{-15}$ . Полная энергия связи  $E$  на протяжении пути изображающего точки в пространстве конфигураций наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры  $S$  резко уменьшалась до достижения стационарного состояния, при котором  $E = -262$  кДж/моль.

Для случая температуры, близкой к комнатной (например,  $T = 300$  К) полная энергия связи  $E$  на протяжении эволюционного процесса уменьшается до достижения стационарного состояния, а затем начинал флуктуировать около положения равновесия ( $E = -260$  кДж/моль). Полная энергия связи  $E$  на протяжении пути изображающего точки в пространстве конфигураций наносистемы на каждой итерации вычислительной процедуры  $S$  резко уменьшалась до достижения стационарного состояния, а затем начинал флуктуировать около положения равновесия ( $E = -260$  кДж/моль). Среднее значение величины  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\langle \Delta t \rangle = 2,40 \cdot 10^{-14}$ . Размах девиаций относительно среднего : максимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 3,73 \cdot 10^{-14}$ , минимальное значение  $\Delta t$  на протяжении эволюции  $\Delta t = 8,49 \cdot 10^{-15}$ .

### Библиографический список

25. Колачев, БА. Металловедение и термическая обработка цветных металлов и сплавов/ БА. Колачев, В.И. Елагин, ВА. Ливанов. — М.: МИСИС, 2005.-432 с.
26. Структура и свойства интерметалл ид ных материалов с нанофаз-ным упрочнением / Ю.Р. Колобов [и др.]; под ред. Е.Н. Каблова, Ю.Р. Колобова. - М.: МИСиС издательский дом, 2008. — 326 с.
27. Алюминиевые сплавы. Металловедение аноминия и его сплавов: справочное руководство/ А.И. Беляев [и др.). — М.: Металлургия, 1971.-352 с.
28. Диаграммы состояния двойных металлических систем : справочник. В 3 т. Т. 1 / под общ.ред. Н.П. Лякишева. - М.: Машиностроение, 1997.- 1024 с.

29. Поварова, К.Б. Принципы создания конструкционных сплавов на основе интерметаллидов. Ч. 1 / К.Б. Поварова, ОА. Банных// Материаловедение. — 1999. - № 2. — С. 27—33.
30. Поварова, К.Б. Принципы создания конструкционных сплавов на основе интерметаллидов. Ч. 2/ К.Б. Поварова, ОА. Банных// Материаловедение. - 1999. - № 3. - С. 29-37.
31. Сплавы на основе алюминидов никеля / В.П. Бунтушкин [и др.] // МиТОМ.- 1999. -№ 1.- С. 32-34.
32. Верин, А.С. Интерметаллид  $Ni_3Al$  как основа жаропрочного сплава / А.С. Верин // МиТОМ. - 1997. - № 5. - С. 26-28.
33. Chang tung-hun, Pan Yung-chuan. Untersuchungen zum Diffusionsverhalten einer Ni $\gamma$ -Legierung // Schweiss. UngSchneid. — 1992. — № 10. — С. 554-559.
34. Хлыстов Е.Н., Степанова Н.Н., Сазонова В. А., Родионов Д.П., Ларионов В.Н., Кашапов О.Р. Формирование структуры модифицированных монокристаллов <001> жаропрочного никелевого сплава/ФММ. - 1992. - № 5. - С. 47-54.
35. Сазонова В.А., Акшенцев Ю.Н., Родионов Д.П., Виноградова Н.И., Степанова Н.Н. Микроструктура быстро закристаллизованных никелевых жаропрочных сплавов/ФММ. —1992 № 5 - С. 150-154.
36. Степанова Н.Н., Сазонова В.А., Родионов Д.П., Кашапов О.Р., Хлыстов Е.Н. Влияние параметров кристаллизации на совершенство монокристаллов никелевого жаропрочного сплава/ФММ. - 1994. - Т. 77. - Вып. 6. - С. 137-145.
37. Степанова Н.Н., Родионов Д.П., Сазонова В. А., Турхан Ю.Э. Высокотемпературное рентгеновское исследование монокристаллов <001> никелевого жаропрочного сплава. Ч. 1/ФММ. - 1995. -Т. 80. -Вып. 6. -С. 74-82.
38. Степанова Н.Н., Родионов Д.П., Сазонова В.А., Турхан Ю.Э. Высокотемпературное рентгеновское исследование монокристаллов <001> никелевого жаропрочного сплава. II. Нагрев в инертной и окислительной среде /ФММ. - 1997. - Т. 83. - Вып. 1. - С. 125-131.
39. Степанова Н.Н. Фазовые превращения в тройных интерметаллидах на основе  $Ni_3Al$  и жаропрочных никелевых сплавах и структура в монокристаллическом состоянии / автореф. дисс. на соиск уч. степени д.ф.-м.н. – Екатеринбург, 2004
40. Гринберг Б. А. Интерметаллиды  $Ni_3Al$  и  $TiAl$ : микроструктура, деформационное поведение / Б. А. Гринберг, М. А. Иванов. — Екатеринбург: УрО РАН, 2002. — 360 с.
41. Колобов Ю. Р. Структура и свойства интерметаллидных материалов с нанофазным упрочнением / [Ю. Р. Колобов, Е. Н. Каблов, Э. В. Козлов и др.] / Под ред. Е. Н. Каблова и Ю. Р. Колобова. — М. : Издательский Дом МИСиС, 2008. — 328 с.
42. Старенченко В. А. Термическое и деформационное упрочнение монокристаллов сплавов со сверхструктурой  $L1_2$  / [В. А. Старенченко, Ю. В. Соловьева, С. В. Старенченко, Т. А. Ковалевская]. — Томск : Изд-во НТЛ, 2006. — 292 с.
43. Massalski T. V. Binary alloy phase diagrams. — Ohio, American Society for Metals: Metals. Park, 1986. — 1. — 1002 p.
44. Мильман Ю.В., Чугунова С.И., Гончарук В.А., Голубенко А.А., Ефимов Н.А., Гончарова И.В., Куприн В.В., Мордовец Н.М. Электронная микроскопия и прочность материалов, 2013. - №19 , С.78-85.
45. Ковтунов А.И. Интерметаллидные сплавы – Тольятти : Изд-во ТГУ, 2018.
46. Родионов Д.П., Филиппов Ю.И., Виноградова Н.И., Казанцева Н.В., Степанова Н.Н., Акшенцев Ю.Л., Давыдов Д.И. Высокотемпературная деформация монокристаллов сплавов на основе  $Ni_3Al$  // Деформация и разрушение материалов. 2009. № 8. С.31-37.
47. Структура сплавов на основе  $Ni_3Al$  после высокотемпературной деформации / автореф. дисс. на соиск уч. степени к.т.н.] – Екатеринбург, 2011

48. Beznosjuk S.A., Minaev B.F., Dajanov R.D., Muldachmetov Z.M. Approximating quasiparticle density functional calculations of small active clusters: strong electron correlation effects // Int. J. Quant. Chem. 1990. 38(6). 779—797.

## 6. Критерии оценивания

### Оценивание содержания отчета

4-балльная шкала	Показатели	Критерии
Отлично	<p>1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в отчете.</p> <p>2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете.</p> <p>3. Своевременность и</p>	<p>Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.</p>
Хорошо	<p>последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета.</p> <p>4. Творческий подход</p>	<p>Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, имеются отдельные недостатки в оформлении отчета по представленному материалу.</p>
Удовлетворительно	<p>студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета.</p> <p>5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.</p>	<p>Задание в целом выполнено, однако имеются недостатки при выполнении в ходе практики отдельных разделов (частей) задания, имеются замечания по оформлению собранного материала в отчете.</p>
Неудовлетворительно		<p>Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.</p>



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий

Утверждено:  
решением ученого совета Университета  
протокол № 6  
от «27» апреля 2021г.

**ПРОГРАММА**

**Производственной практики**

**Преддипломная практика**

**04.04.01 Химия**

*Профиль*

**«Квантовые технологии, компьютерный нанотехнологический инжиниринг, физикохимия и экспертиза материалов»**

Форма обучения **очная**

Барнаул 2021 г.

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2021-2022 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 4 от «01» июля 2021г.

---

### **Визирование программы для исполнения в очередном учебном году**

Программа практики пересмотрена, обсуждена и одобрена для исполнения в 2022-2023 учебном году на заседании на заседании ученого совета ИХиХФТ, протокол № 5 от «01» июля 2022 г.

---

## 1. Вид практики, способы (при наличии) и формы ее проведения

**Вид практики:** производственная практика.

**Тип практики:** *преддипломная практика*

**Способы проведения (при наличии):** стационарная / выездная.

**Форма проведения практики:** дискретная по видам практик.

## 2. Перечень планируемых результатов обучения при прохождении практики, соотнесённых с планируемыми результатами освоения ОПОП

### 2.1. Общепрофессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Общепрофессиональные навыки	<b>ОПК-1.</b> Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	<b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.
	<b>ОПК-2.</b> Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук	<b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований. <b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

Категория (группа) общепрофессиональных компетенций	Код и наименование общепрофессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения общепрофессиональной компетенции
Компьютерная грамотность при решении профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.</b> Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	<b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.
Представление результатов профессиональной деятельности	<b>ОПК-4.</b> Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов	<b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы. <b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов. <b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР. <b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

## 2.2. Профессиональные компетенции выпускников и индикаторы их достижения в области и (или) сфере профессиональной деятельности выпускников

Тип задачи профессиональной деятельности	Код и наименование профессиональной компетенции	Код и наименование индикатора достижения профессиональной компетенции
Научно-исследовательский	<b>ПК-1.</b> Способен осуществлять научно-исследовательские разработки в области новейших квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инжиниринга и физикохимии	<b>ПК-1.1.</b> Знает теоретические основы и методологию квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инжиниринга и физикохимии материалов. <b>ПК-1.2.</b> Умеет планировать этапы исследования по изучению наноструктурированных композиционных материалов с заданными свойствами. <b>ПК-1.3.</b> Владеет навыками применения современного программного обеспечения при

	материалов	проведении разработок в области новейших квантовых технологий, компьютерного наноинжиниринга и физикохимии материалов. <b>ПК-1.4.</b> Умеет представлять результаты научно-исследовательских разработок с использованием ИКТ.
	<b>ПК-2.</b> Способен планировать и осуществлять научно-исследовательскую деятельность и выбирать методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии в составе научного коллектива.	<b>ПК-2.1.</b> Знает методы и методологию планирования научно-исследовательской деятельности в составе научного коллектива. <b>ПК-2.2.</b> Умеет составлять общий план исследования и детальные планы отдельных стадий научно-исследовательской деятельности. <b>ПК-2.3.</b> Умеет применять расчетно-теоретические, экспериментальные методы и методики решения поставленных научно-исследовательских задач выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии. <b>ПК-2.4.</b> Умеет представлять результаты научно-исследовательских разработок с использованием ИКТ.
	<b>ПК-3.</b> Способен проводить обработку и анализ научно-технической информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии	<b>ПК-3.1.</b> Знает общие принципы обработки и анализа информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии. <b>ПК-3.2.</b> Умеет проводить поиск специализированной информации в научной литературе и информационных базах данных <b>ПК-3.3.</b> Умеет анализировать и обобщать результаты научно-исследовательской деятельности по тематике исследования в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии.

### 3. Место практики в структуре образовательной программы

Производственная практика (преддипломная практика) относится к обязательной части блока 2 «Практика» основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОПОП ВО) по направлению подготовки 04.04.01 Химия.

### 4. Объем практики

Объем практики составляет 3 зачетных единицы (108 ч.) Продолжительность практики регламентируется графиком учебного процесса.

### 5. Порядок организации и содержание практики

Практика проходит в форме индивидуальной самостоятельной работы студентов под руководством руководителя от кафедры или профильных организаций.

Практика включает выполнение обучающимися ряда заданий, направленных на формирование требуемых компетенций, выполнение задач, определенных в индивидуальном задании на практику.

Содержание практики определяется кафедрой.

Практика начинается с установочного занятия (организационного собрания), на котором студенты знакомятся с целями и задачами практики, объемом и особенностями работ, требованиями к зачёту. Проводится инструктаж по технике безопасности.

<b>Разделы (этапы) практики</b>	<b>Виды работы на практике, включая самостоятельную работу студентов</b>	<b>Формы текущего контроля</b>
Организационный этап	Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ (в АлтГУ и на месте прохождения практики).	Собеседование с руководителем практики
Основной этап	Знакомство со структурой предприятия (организации) и правилами внутреннего распорядка. Подготовка литературного обзора по теме исследования Проведение эксперимента по теме исследования	Индивидуальные задания
Заключительный этап	Подготовка отчета Сдача отчета	Отчет по практике

#### **6. Формы отчетности по практике**

По завершению производственной практики (преддипломная практика) на кафедру сдаются: отчет по практике, в основе которого выполненное индивидуальное задание и характеристика с места прохождения практики (только в случае прохождения практики в профильных организациях), с обязательным указанием факта ознакомления с инструкциями по охране труда и технике безопасности.

#### **7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике**

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по практике приведен в приложении 1.

#### **8. Перечень учебной литературы и ресурсов сети «Интернет», необходимых для проведения практики**

а) основная литература:

1. Федеральным государственным образовательным стандартом по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» высшего образования, утвержденный приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 23.09.2015г. №1042
2. ГОСТ Р 7.0.5.-2008. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Библиографическая ссылка. Общие требования и правила составления. Введ. 2009-01-01. – М.: Стандартинформ, 2008. – 22 с. (<http://gostexpert.ru/gost/gost-7.0.5-2008>).

б) дополнительная литература:

1. Положение «О практической подготовке обучающихся в ФГБОУ ВО "Алтайский государственный университет».
2. Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет»

в) ресурсы сети «Интернет»

1. Поискковые системы (Google, Yandex и др.).
2. Реферативная база данных ВИНТИ РАН.

3. Реферативная база данных научной периодики «Scopus» (<http://www.scopus.com/>).
4. Реферативно-библиографическая база данных научной периодики «Web of Science» (<http://www.webofknowledge.com/>).
5. Сеть патентной информации Европейского патентного ведомства «Espacenet» (<http://worldwide.espacenet.com/>).
6. Библиотека ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет (<http://elibrary.asu.ru/>)
7. Электронно-библиотечная система Издательства Лань (<https://e.lanbook.com/>)
8. Электронно-библиотечная система Университетская библиотека on-line (<http://biblioclub.ru>)
9. Электронная библиотека Юрайт (<https://biblio-online.ru/>)

#### **9. Перечень информационных технологий, используемых при проведении практики, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

информационные технологии, позволяющие эффективно организовать самостоятельную работу, индивидуализировать процесс обучения, активизировать познавательную деятельность обучающихся.

1. Microsoft Windows 7 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная);
2. Microsoft Office 2010 № лицензии 60674416 от 19.07.2012 г. (бессрочная)..

#### **10. Материально-техническая база, необходимая для проведения практики**

Для полноценного прохождения практики обеспечен доступ студенту к современной аппаратуре (лабораторным установкам, приборам (соответствующим требованиям проведения современных методов контроля и анализа веществ), коммуникационному оборудованию, компьютерной технике и др.), информационным системам, программным продуктам, базам данных и т.д., находящихся на базах практики и используемых студентом для выполнения индивидуальных заданий в рамках прохождения практики.

#### **11. Организация практики для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья (ОВЗ) и инвалидов**

Практика является обязательным разделом адаптированной образовательной программы. Она представляет собой вид учебных занятий, непосредственно ориентированных на профессионально практическую подготовку обучающихся, в том числе обеспечивающую подготовку и защиту выпускной квалификационной работы.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья форма проведения практики устанавливается с учетом особенностей психофизического развития, индивидуальных возможностей и состояния здоровья.

При определении мест прохождения практики обучающимся инвалидом образовательная организация учитывает рекомендации, данные по результатам медико-социальной экспертизы, содержащиеся в индивидуальной программе реабилитации инвалида, относительно рекомендованных условий и видов труда.

При необходимости для прохождения практики создаются специальные рабочие места в соответствии с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности.

Оснащение (оборудование) специальных рабочих мест для практики обучающихся инвалидов осуществляется индивидуально для конкретного инвалида, а также для группы инвалидов, имеющих однотипные нарушения функций организма и ограничения жизнедеятельности.

При необходимости для прохождения практики инвалидами создаются специальные рабочие места с учетом нарушенных функций и ограничений их жизнедеятельности в

соответствии с требованиями, утвержденными приказом Министерства труда России от 19 ноября 2013 года № 685н.

## **12. Методические рекомендации по организации и прохождению практики**

Перед прохождением практики обучающийся должен внимательно изучить программу практики и обратиться к соответствующим нормативным материалам с тем, чтобы быть подготовленным к выполнению поручений, данных руководителем практики. Обучающийся обязан:

1. Выполнить индивидуальный план прохождения практики и согласовать его с руководителем практики.
2. Соблюдать правила внутреннего распорядка предприятия, учреждения, организации, в которых он проходит практику.
3. Выполнять отдельные поручения руководителя практики, если это соответствует целям и задачам практики.
4. Не разглашать сведения, содержащие государственную, служебную, личную, семейную, коммерческую тайну, ставшие ему известными при прохождении практики.
5. Выполнять программу практики.
6. Подготовить материалы для отчета.
7. По окончании практики составить письменный отчет о прохождении практики и в установленный учебным планом срок защитить его.

Перед началом практики руководитель практики от кафедры проводит установочную конференцию, на которой обучающимся разъясняют порядок прохождения практики и ее содержание.

В период подготовки к практике и ее прохождении обучающийся:

- изучает необходимую научную литературу;
- по прибытии на место практики составляет индивидуальный план прохождения практики;
- строго соблюдает правила охраны труда и техники безопасности;
- поддерживает в установленные дни контакты с руководителем практики, а в случае возникновения непредвиденных обстоятельств или неясностей сообщает о них незамедлительно;
- реализует плановые мероприятия, предусмотренные программой практики;
- собирает и обобщает материалы, необходимые для подготовки отчета по практике;
- составляет отчет о проделанной работе и представляет его преподавателю-руководителю для подведения итогов практики.



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

ФОНД  
ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

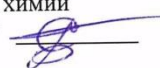
по производственной практике  
преддипломная практика


04.04.01 Химия

Профиль

**«Квантовые технологии, компьютерный нанонинжиниринг, физикохимия и  
экспертиза материалов»**

Разработчики:

Зав. кафедрой физической и  
неорганической химии  
/С.А. Безносюк/ 

Доцент кафедры физической  
и неорганической химии  
/О.А. Маслова/ 

Барнаул 2021

## ПАСПОРТ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

### 1. Перечень формируемых компетенций:

ОПК-1. Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения

ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности

ОПК-4. Способен готовить публикации, участвовать в профессиональных дискуссиях, представлять результаты профессиональной деятельности в виде научных и научно-популярных докладов

ПК-1. Способен осуществлять научно-исследовательские разработки в области новейших квантовых технологий, компьютерного нанотехнологического инжиниринга и физикохимии материалов

ПК-2. Способен планировать и осуществлять научно-исследовательскую деятельность и выбирать методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии в составе научного коллектива.

ПК-3. Способен проводить обработку и анализ научно-технической информации в выбранной области квантовых технологий химии, физикохимии, биохимии

### 2. Планируемые результаты освоения дисциплины (модуля) / практики:

№ п/п	Контролируемые разделы дисциплины (модуля) / Контролируемые элементы практики	Код контролируемой компетенции (или её части)	Код и наименование индикатора достижения (только для ФГОС3++)	Наименование оценочного средства
1	2	3	4	5
1	Организационный этап	ОПК-1 ОПК-2 ОПК-3 ОПК-4 ПК-1 ПК-2 ПК-3	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками</p>	Индивидуальные задания

			<p>проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
2	Основной этап	<p>ОПК-1</p> <p>ОПК-2</p> <p>ОПК-3</p> <p>ОПК-4</p> <p>ПК-1</p> <p>ПК-2</p> <p>ПК-3</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических</p>	Индивидуальные задания

			<p>методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
3	Заключительный этап	<p>ОПК-1</p> <p>ОПК-2</p> <p>ОПК-3</p> <p>ОПК-4</p> <p>ПК-1</p> <p>ПК-2</p>	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения</p>	Индивидуальные задания

		ПК-3	<p>для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.</p> <p><b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.</p> <p><b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.</p> <p><b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.</p> <p><b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы.</p> <p><b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.</p> <p><b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.</p> <p><b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.</p>	
	Промежуточная аттестация по	ОПК-1 ОПК-2	<p><b>ОПК-1.1.</b> Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.</p>	отчет

	<p>практике – дифференцирован ый зачет</p>	<p>ОПК-3 ОПК-4 ПК-1 ПК-2 ПК-3</p>	<p>наук. <b>ОПК-1.2.</b> Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-1.3.</b> Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-2.1.</b> Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-2.2.</b> Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований. <b>ОПК-2.3.</b> Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук. <b>ОПК-3.1.</b> Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности. <b>ОПК-3.2.</b> Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием. <b>ОПК-4.1.</b> Знает методы и методологию представления результатов научной работы. <b>ОПК-4.2.</b> Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов. <b>ОПК-4.3.</b> Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР. <b>ОПК-4.4.</b> Принимает участие в</p>	
--	----------------------------------------------------	---------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--

			профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.	
--	--	--	--------------------------------------------------------------------------------------	--

### 3. Типовые оценочные средства, необходимые для оценки планируемых результатов обучения по практике:

#### ТЕКУЩИЙ КОНТРОЛЬ ПО ПРАКТИКЕ

**Оценочное средство-1:** индивидуальное задание.

- 1. Цель:** выполнение научно-исследовательской работы, освоение методик исследования
- 2. Контролируемый раздел дисциплины (модуля):** Организационный этап, основной этап.
- 3. Проверяемые компетенции (код):** ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ПК-1, ПК-2, ПК-3

#### 4. Индикаторы достижения:

ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.1. Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.

ОПК-2.2. Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.

ОПК-2.3. Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

-3.1. Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ОПК-4.1. Знает методы и методологию представления результатов научной работы.

ОПК-4.2. Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.

ОПК-4.3. Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.

ОПК-4.4. Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

#### 5. Пример оценочного средства:

Выполнение отчета по индивидуальным заданиям

14. Организационное собрание. Ознакомление с индивидуальным заданием на практику. Инструктаж по ТБ. Собеседование с руководителем практики
15. Выбор направления научного исследования (1 семестр)
16. Подготовка библиографического списка по теме исследования
17. Освоение и применение освоенных методов исследования

#### 6. Критерии оценивания

##### Оценивание содержания отчета

4-балльная шкала	Показатели	Критерии
Отлично	б. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий

	отчете. 7. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 8. Своевременность и	подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным соответствием предъявляемым требованиям.
Хорошо	последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета. 9. Творческий подход	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, имеются отдельные недостатки в оформлении отчета по представленному материалу.
Удовлетворительно	студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета. 10. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.	Задание в целом выполнено, однако имеются недостатки при выполнении в ходе практики отдельных разделов (частей) задания, имеются замечания по оформлению собранного материала в отчете.
Неудовлетворительно		Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.

**7. Рекомендуемый перечень вопросов для самостоятельной подготовки:**

7. Выбор направления научного исследования (1 семестр)
8. Состояние вопроса актуальности темы исследования
9. Освоенные методы исследования

**ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ ПО ПРАКТИКЕ**

1. Форма проведения промежуточной аттестации: дифференцированный зачет (зачет с оценкой).
2. Процедура проведения: аттестация по итогам практики проводится на основании оформленного в соответствии с требованиями, установленными программой практики отчета по практике, в котором руководителем практики выставляется оценка. По итогам аттестации выставляется дифференцированный зачет (зачет с оценкой).

**КИМ (контрольно-измерительные материалы) включают:**

письменный отчет по практике.

**3. Проверяемые компетенции (код):** ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ПК-1, ПК-2, ПК-3

**4. Индикаторы достижения:**

- ОПК-1.1. Знает теоретические основы избранной области химии и смежных наук.  
ОПК-1.2. Умеет использовать современное оборудование, программное обеспечение и базы данных профессионального назначения для решения экспериментальных задач в избранной области химии и смежных наук.  
ОПК-1.3. Владеет навыками использования расчетно-теоретических методов и профессиональных баз данных при решении профессиональных задач в избранной области химии и смежных наук.  
ОПК-2.1. Владеет навыками проведения анализа результатов полученных в ходе исследования в избранной области химии и смежных наук.  
ОПК-2.2. Владеет навыками интерпретации и обобщения результатов исследований.



ОПК-2.3. Умеет формулировать заключения и выводы по результатам исследований в избранной области химии и смежных наук.

-3.1. Знает современные вычислительные методы и границы их применения при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Умеет применять и адаптировать существующие программные продукты при решении задач профессиональной деятельности.

ОПК-3.2. Владеет вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.

ОПК-4.1. Знает методы и методологию представления результатов научной работы.

ОПК-4.2. Умеет представлять результаты профессиональной деятельности в виде отчетов и научных и научно-популярных докладов.

ОПК-4.3. Владеет навыками подготовки публикаций по теме научно-исследовательской работы/ВКР.

ОПК-4.4. Принимает участие в профессиональных дискуссиях на текущих занятиях и других видах учебной деятельности.

### **5. Пример оценочного средства:**

В отчете по учебной практике отражается проделанная студентом работа по заданиям, приведенным в программе практики. Отчет оформляется согласно требованиям и сдается на кафедру в печатном виде. Отчет студента по практике состоит из титульного листа, листа с заданием и непосредственно, отчета. Титульный лист является первой страницей отчета и служит источником информации об авторе, руководителях практики, месте и времени написания отчета. Лист с заданием содержит индивидуальные задания и сроки их выполнения. В отчете студент приводит результаты прохождения практики согласно индивидуальным заданиям.

### **Пример отчета:**

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии

#### **ОТЧЕТ**

о прохождении производственной практики  
(научно-исследовательская работа)

Выполнил(а) студент(ка)

\_\_\_\_ курса, \_\_\_\_ группы

Направление подготовки 04.04.01 Химия

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Руководитель практики

\_\_\_\_\_  
(подпись)

\_\_\_\_\_  
ФИО

Оценка \_\_\_\_\_

(дата сдачи отчета)

БАРНАУЛ 20\_\_

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Алтайский государственный университет»  
Институт химии и химико-фармацевтических технологий  
Кафедра физической и неорганической химии  
ИНДИВИДУАЛЬНОЕ ЗАДАНИЕ  
на производственную практику  
(научно-исследовательская работа)

Студент \_\_\_\_\_  
Курс \_\_\_\_\_ группа \_\_\_\_\_ направление подготовки 04.04.01 Химия \_\_\_\_\_  
Направленность (профиль) \_\_\_\_\_  
Сроки прохождения практики \_\_\_\_\_  
Место прохождения практики \_\_\_\_\_

№ п/п	Содержание индивидуальных заданий	Рабочий график (план) выполнения
	Знакомство со структурой предприятия (организации) и правилами внутреннего распорядка.	
	Подготовка литературного обзора по теме «Квантово-механический расчет устойчивости наночастиц GaAs со структурными вакансиями»	
	Компьютерное моделирование релаксационных процессов методом квантовой нанокинетики. Анализ полученных данных.	
	Оформление отчета	
	Сдача отчета	

Руководитель практики \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Заведующий кафедрой \_\_\_\_\_  
(ФИО)

\_\_\_\_\_ / \_\_\_\_\_ /  
(подпись)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Содержание

ВВЕДЕНИЕ .....	99
1 ФИЗИКО–ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ .....	100
1.1 Кристаллическое строение .....	100
1.2 Получение арсенида галлия .....	100
1.2.1 Метод Чохральского .....	100
1.2.2 Метод Бриджмена .....	101
1.3 Применение арсенида галлия .....	102
2 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ GaAs СО СТРУКТУРНЫМИ ВАКАНСИЯМИ .....	102
2.1 Метод нелокального функционала плотности .....	102

2.2 Компьютерное моделирование релаксационных процессов методом молекулярной механики .....	104
2.3 Компьютерное моделирование релаксационных процессов методом квантовой нанокинетики .....	106
2.4 Техника безопасности .....	107
2.4.1 Требования безопасности, которые должны соблюдаться при работе с электроприборами .....	107
2.4.2 Действия при пожаре и несчастном случае .....	107
3 АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ ДАННЫХ .....	107
3.1 Результаты расчета равновесных параметров связи методом нелокального функционала плотности .....	107
3.2 Результаты компьютерного моделирования релаксационных процессов методом молекулярной механики .....	108
3.3 Результаты компьютерного моделирования релаксационных процессов методом квантовой нанокинетики .....	111
ВЫВОДЫ .....	116
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК .....	116
ВВЕДЕНИЕ	

Соединения состава  $A^{III}B^V$  представляют большой интерес в полупроводниковой сфере [1]. Им уделяется большое внимание в научных публикациях, в которых эти полупроводники активно рассматриваются в качестве компонентов электронной техники. Исследование свойств таких соединений позволяет создавать новые приборы [2].

Уступая кремнию и германию по некоторым свойствам и применению, арсенид галлия также обладает характеристиками, необходимыми для использования в электронной технике, для создания светодиодов, транзисторов, лазеров различной мощности, фотоприемников и многого другого [3, 4].

В середине прошлого века началось создание различных приборов на основе GaAs. В 1952 г. американский физик У.Б. Шокли сконструировал полевой транзистор и параллельно в это время стало известно о наличии полупроводниковых свойств у класса соединений  $A^{III}B^V$  [5]. Спустя 10 лет началось активное использование биполярных транзисторов, как приборов микроэлектроники. В 1961 г. М. Джонсом и Е. Вурстом были описаны первые транзисторы на GaAs, которые по своим свойствам превосходили кремниевые [6].

Одновременно с этими открытиями проводилась разработка различных методов, позволяющих получить кристаллы GaAs. В 1956 году с помощью метода Чохральского были выращены кристаллы арсенида галлия, которые обладали достаточно высокой степенью чистоты [7, 8].

Для исследуемого соединения характерно достаточно большое значение ширины запрещенной зоны (при 300 К – 1,424 эВ), высокая подвижность электронов, обуславливающая возможность работы приборов на частотах до 250 ГГц. Приборы, функционирующие на основе этого полупроводника, производят меньше шума, чем, например, кремниевые приборы [9].

Большой интерес представляет изучение вакансий в кристаллах GaAs, нарушающих соблюдение строгой трансляционной симметрии и в целом оказывающих влияние на некоторые свойства соединения. В связи с этим актуальным является изучение влияния различных дефектов на устойчивость кристаллических систем [10, 11].

На сегодняшний день GaAs – очень перспективное полупроводниковое соединение, обладающее большими возможностями в различных областях электроники [12].

Целью данной работы является исследование устойчивости наночастиц GaAs со структурными вакансиями.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) Построение моделей наночастиц GaAs со структурными вакансиями;

- 2) Расчет парных корреляционных потенциалов внутрикристаллической ковалентной связи;
- 3) Исследование устойчивости наночастиц GaAsco структурными вакансиями методом молекулярной механики;
- 4) Исследование методом квантовой нанокинетики релаксационных процессов наночастиц GaAs со структурными вакансиями.

## 1 ФИЗИКО–ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ

### 1.1 Кристаллическое строение

Полупроводниковое соединение арсенида галлия представляет собой темно-синие кристаллы с температурой плавления 1238 °С, также этот полупроводник, по сравнению с кремнием, менее теплопроводен и более хрупок [13].

Так как арсенид галлия относится к соединениям типа  $A^{III}B^V$ , он, также как и многие другие соединения этого состава, обладает структурой цинковой обманки (сфалерита) [14]. Два атома – галлий и мышьяк входят в состав элементарной ячейки, которая воспроизводится в пространстве таким образом, что каждый из атомов в конечном счете образует гранецентрированную кубическую решетку [15].

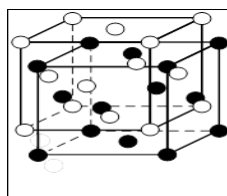


Рисунок 1 – Кристаллическая решетка GaAs

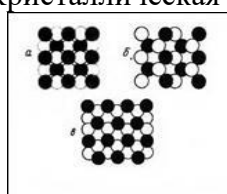


Рисунок 2 – Основные кристаллические плоскости GaAs  
а) 100 б)110 в)111

Гранецентрированные решетки галлия и мышьяка совместно вклиниваются и при этом перемещаются один от другого на одну четвертую главной диагонали (рисунок 1). На рисунке 2 изображены основополагающие кристаллические плоскости решетки арсенида галлия. Находящийся на поверхности мышьяк с координатами (100) связан с двумя атомами галлия. Оставшиеся связи – свободны. На рисунке 2 б в плоскости (110) изображено равноценное количество атомов галлия и мышьяка, причем каждый из них связан лишь одной связью с нижним слоем. Атомы на рисунке 2 в (111) связаны тремя связями с атомами галлия из нижнего слоя. Оставшаяся четвертая связь является свободной [16].

### 1.2 Получение арсенида галлия

Кристаллы GaAs можно вырастить с помощью горизонтального метода Бриджмена и метода Чохральского [17]. Эти два метода позволяют получить кристаллы GaAs с различной подвижностью и концентрацией электронов. Например, в случае метода Чохральского возможно получить кристаллы крупных размеров с концентрацией электронов  $4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и подвижностью близкой к  $7000 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ , а в случае второго метода – концентрация электронов будет равной  $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ , а подвижность –  $8000 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$  [18].

#### 1.2.1 Метод Чохральского

Являясь одним из методов выращивания кристаллов, метод Чохральского заключается в их вытягивании вверх от поверхности расплава. Инициация кристаллизации производится за счет контакта затравочного кристалла с поверхностью расплава [19].

Одним из способов вытягивания кристаллов является запаивание в ампуле, которое может осуществляться при создании необходимого давления паров As. Так как пары мышьяка достаточно агрессивны, то используют установки, детали которых выполнены из стойких материалов, например, из графита. Также следует отметить, что кварц может осложнить процесс вытягивания, поэтому необходимо предотвратить попадание кремния. Альтернативными являются нитрид алюминиевые детали установки (например, тигли) [20].

Печь сопротивления обеспечивает температуру, выходящую за пределы 500°C, в этих условиях находится верх ампулы. Внутренняя часть ампулы покрыта оболочкой, в которой имеется железный сердечник, благодаря которому происходит вращение затравки. В таких условиях осуществляется вытягивание со скоростью 4 см/час и вращение затравки 19 об/мин. Диаметр полученных кристаллов равен примерно 3 см, а длина – до 15 см [21].

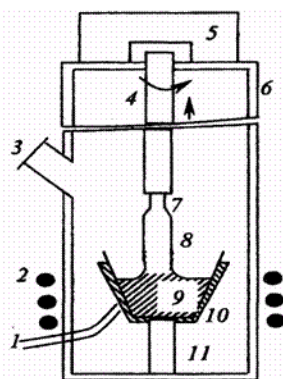


Рисунок 3– Схема установки для выращивания кристаллов GaAs методом Чохральского: 1 – термопара; 2 – печь; 3 – отверстие для визуального наблюдения; 4 – ось вращения; 5 – вращательное устройство; 6 – водяная рубашка; 7 – затравка; 8 – кристалл; 9 – расплав; 10 – графитовый источник нагревания; 11 – теплоизоляционная подложка

Еще одним вариантом выращивания кристалла по методу Чохральского является плавка GaAs с помощью защитной пленки. В качестве такой пленки часто используют соединение  $V_2O_3$ , которое препятствует испарению паров As. Благодаря своим свойствам, окись бора облегчает процесс выращивания кристалла. На поверхности расплава могут находиться окислы, которые  $V_2O_3$  растворяет, блокируя возникновение дополнительных центров кристаллизации [22].

В общем случае, тигли с расплавом GaAs располагаются в камере при наличии источника тепла, необходимого для сохранения расплавленного состояния. Кристалл растет за счет затравки, помещенной в расплав с помощью тросика и которая затем медленно вытягивается. При вытягивании затравки с ней тянется жидкость, которая при низких температурах повторяет ее структуру, становясь твердой [23].

Второй метод позволяет получить более совершенные кристаллы [24].

### 1.2.2 Метод Бриджмена

Метод Бриджмена – еще один способ выращивания кристаллов GaAs.

Кристаллы выращивают в специальной ампуле, в которой поддерживается давление паров мышьяка. Ампула находится внутри кварцевой лодочки, которую помещают в двухзонную печь. Температура печи в зоне с арсенидом галлия равна 1258°C (на 20 °C больше его точки плавления), а с мышьяком – немного превышает 600 °C. Пары мышьяка взаимодействуют с галлием, образуя расплав GaAs [25]. Благодаря температурному градиенту и движению лодочки (скорость равна 0,5–2,0 см/ч), расплав арсенида галлия затвердевает и кристалл растет. Следует отметить, что необходимо придерживаться указанной температуры (613 °C), так как отклонения от нее могут вызвать нежелательные свойства у кристаллов, например, пористость [26].

Кварцевая лодочка может стать причиной попадания магния или кремния в кристалл GaAs. Для получения кристаллов более высокой чистоты лодочку подвергают пескоструйной обработке [27].

У данного метода есть как достоинства, так и недостатки. Одним из недостатков является D-образная форма получаемых подложек (вследствие D-образного сечения лодочки), требующая дополнительной обработки. Также материал, полученный этим методом, нуждается в легировании хромом, который может привести к поломке прибора, в случае его распределения в объеме арсенида галлия.[28] К достоинствам можно отнести возможность получения более чистых и совершенных кристаллов по сравнению с методом Чохральского [29].

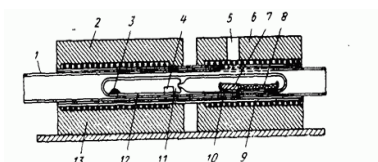


Рисунок 4– Схема установки для выращивания кристаллов GaAs методом Бриджмена: 1 – керамическая труба; 2,6 – печь; 3 – избыточный As; 4 – кусочек кварца; 5 – окно; 7 – затравка; 8 – расплав; 9 – нагревательная обмотка; 10 – лодочка; 11 – разбиваемая перемычка; 12 – ампула; 13 – теплоизоляция

### 1.3 Применение арсенида галлия

На сегодняшний день область применения арсенида галлия очень разнообразна. Его используют при создании полупроводниковых приборов (более 70%), лазеров, диодов, транзисторов, в электронной технике, в микроэлектронике [30,31].

Получают диоды: Ганна, Шоттки и лавинно-пролетные. Диоды используются как элементы интегральных схем (аналоговых и цифровых) [32].

Транзисторы из арсенида галлия делят на полевые (с затвором Шоттки, с p-n переходом, гетероструктурные, вертикально-структурные) и биполярные (гетероструктурные, гетероструктурные инвертированные) [32].

Оптические приборы из арсенида галлия – светодиоды, солнечные батареи, лазеры [33, 34].

При изготовлении лазеров и светодиодов применяют легированный кремнием арсенид галлия, а также туннельные диоды из такого материала работают при достаточно высоких температурах и частотах по сравнению с кремнием и германием [35, 36].

Полупроводниковое соединение арсенида галлия, легированное хромом, находит широкое применение в инфракрасной оптике, а легированное цинком – при создании оптоэлектронных приборов [37, 38].

Арсенид галлия – это перспективное полупроводниковое соединение, дальнейшее исследование свойств которого позволит расширить область его применения [39].

## 2 КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ GaAs СО СТРУКТУРНЫМИ ВАКАНСИЯМИ

### 2.1 Метод нелокального функционала плотности

Расчет энергий связи в молекуле GaAs можно провести с помощью программного модуля WINBOND, в который входит ряд программ: АТОМ, RO, KULON и СУММА.

Исследование GaAs началось с программы АТОМ, в которой заполнялась файл-форма для атомов Ga и As. Файл-форма включает в себя информацию о главных квантовых числах, о зарядах ядер рассматриваемых атомов, количестве подоболочек, номере подуровня, количестве подоболочек в оболочке, количестве электронов на оболочке, главных квантовых числах по подуровням, орбитальных квантовых числах, а также о порядковом номере орбитали.

Также необходимо рассчитать значения параметров  $\kappa$  (каппа) и  $\lambda$  (лямбда) – удвоенных эффективных орбитальных квантовых чисел оболочек атома и зарядов экранирования ядра соответственно. Параметр каппа рассчитывают по формуле:

$$\kappa_{nl} = 2L + 2 \quad (1)$$

Параметр лямбда рассчитывают по формуле:

$$\lambda = 2\xi, \quad (2)$$

где значение  $\xi$  определяют по формуле:

$$\xi = \frac{Z - S_{экр}}{n^*} \quad (3)$$

Далее результаты, полученные после расчетов  $\kappa$  и  $\lambda$ , загружают в программу, в которой происходит варьирование  $\lambda$ . Операцию варьирования проводят до получения минимальной энергии и постоянных значений  $\lambda$ . Полученные значения  $\kappa$  и  $\lambda$  для атомов галлия и мышьяка представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Рассчитанные параметры  $\kappa$  и  $\lambda$  для Ga и As

Атом	Главное квантовое число	$\kappa$	$\lambda$
Ga	1	2	61,400
	2	4	26,850
	3	6	13,160
	4	3	2,700
As	1	2	65,400
	2	4	28,850
	3	6	14,500
	4	3	3,400

Следующая программа – RO. В ней, как и в предыдущей программе, необходимо заполнить форму с указанием соответствующих параметров для атомов Ga и As. Расчет параметра  $\lambda$  проводить не нужно, так как его значения берутся из программы АТОМ, полученных ранее. После заполнения формы производится запуск программы RO.EXE и осуществляются действия, аналогично предыдущим. Программа RO позволяет получить значения радиусов электронных сфер исследуемых атомов, представленных в таблице 2.

Таблица 2 – Радиусы электронной сферы Ga и As

Атом	$R_c, (a_0)$
Ga	2,800
As	2,320

В программе KULON указываются входные данные не для атомов, а для молекул, так как она демонстрирует, как связана энергия кулоновского взаимодействия от заданного расстояния между ядрами. В программе также необходимо заполнить файл-форму, содержащую информацию о количестве атомов, заряде атомов Ga и As, числе точек расчетов и их координатах, периодах атомов, количестве электронов на уровнях у атомов Ga и As, а также параметры  $\kappa$  и  $\lambda$ , полученные в программе АТОМ.

С помощью программы SUMMA рассчитана энергия взаимодействия пар GaAs и AsGa на основании данных, полученных в программе RO. SUMMA позволяет получить информацию о распределении энергии обменно-корреляционного взаимодействия между двумя атомами на заданном расстоянии. Как и во всех предыдущих программах заполняется файл-форма, содержащая данные для впереди стоящего атома в паре, а именно: радиус атома из программы RO, главное квантовое число для остова, максимальное орбитальное квантовое число для остова, максимальные главные квантовые числа для s, p, d-подоболочек атома, максимальные главные квантовые числа для s, p, d, f-подоболочек остова,  $\kappa$  и  $\lambda$  для остова, количество и координаты валентных электронов.

После проделанных операций получают различные параметры связи (длина, энергия, частота нулевых колебаний) в программе WINBOND.

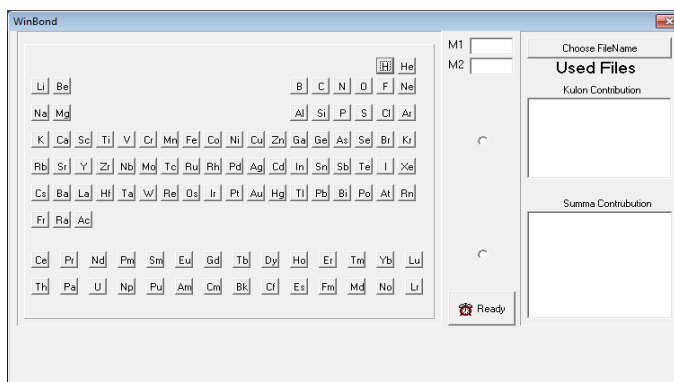


Рисунок 5 – Окно программы WINBOND

Для получения этих параметров необходимо воспользоваться данными программ KULON и SUMMA. Также получают кривые распределения энергии выбранной пары атомов в зависимости от расстояния между ядрами Ga и As.

## 2.2 Компьютерное моделирование релаксационных процессов методом молекулярной механики

Программный пакет NanoEvolver позволяет исследовать релаксационные процессы. В работе была изучена устойчивость соединения GaAs без дефектов, а также со структурными вакансиями (дефектами). С помощью данного программного модуля получены значения энергии наночастиц, а также радиальные функции распределения атомов в исследуемых системах.

Перед началом работы в программном модуле NanoEvolver необходимо построить модель GaAs. В ходе эксперимента были построены компьютерные модели нанокристаллических структур с вакансиями. В качестве исходной структуры была выбрана наночастица размером  $5 \times 5 \times 5$  элементарных ячеек, состоящая из 1000 атомов. Модели с вакансиями были построены из исходной структуры путем удаления одного атома галлия и одного атома мышьяка из различных участков структуры. Ячейки, из которых были убраны атомы, не имели общих границ.

Таким образом, было образовано следующие 4 модели наночастиц:

1. Вакансия располагается в вершине наночастицы;
2. Вакансия располагается на ребре наночастицы;
3. Вакансия располагается на грани наночастицы;
4. Вакансия располагается в объеме наночастицы.

Далее полученная модель используется в программе NanoEvolver, позволяющей наглядно изобразить структуру не только в виде связевого графа, а также в шаровом представлении.

Для построения связевого графа в программу была загружена модель GaAs ( $5 \times 5 \times 5$ ), а затем с помощью вызова команды Graph были указаны параметры для пары GaAs (5,5). Далее фиксируют граф с помощью команды LockGraph. Полученные результаты представлены на рисунках 6 и 7.

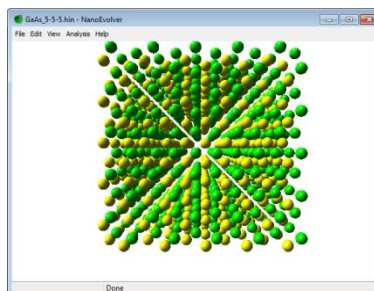


Рисунок 6 – Компьютерная модель исследуемой структуры



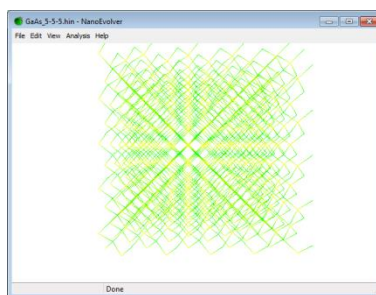


Рисунок 7 –Главное окно программы NanoEvolver со связевым графом GaAs

На рисунке 6 изображена компьютерная модель исследуемой структуры арсенида галлия. На рисунке 7 изображен связевый граф исследуемой структуры. Желтым цветом обозначены атомы Ga, зеленым – As.

После построения графа вызывают команду SetParameters из меню Edit и задают необходимые параметры, представленные на рисунке 8.

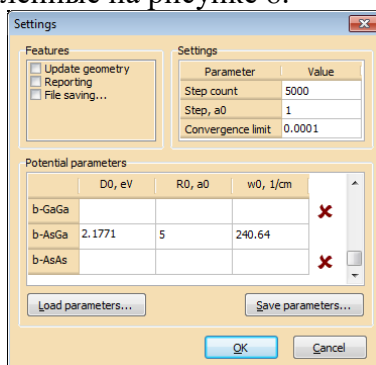


Рисунок 8 – Окномодуля «Set Parameters»

Методом нелокального функционала плотности были рассчитаны параметры, указанные выше.

Далее с помощью панельного меню Analysis вызываем команду Radialdistributionfunction и указываем необходимые параметры, представленные на рисунке 11. MaxR, a0 – диапазон расположения графика, dR, a0 – шаг между точками.

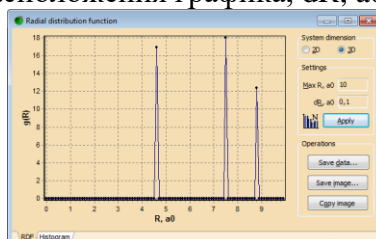


Рисунок 9–Радиальная функция распределения атомов

Последнее действие – оптимизация системы. Из панельного меню Edit вызываем команду Evolve и запускаем вычислительную процедуру.

Все вышеописанные действия повторяем для GaAs со структурными вакансиями в различных частях системы. Также были исследованы структуры без 10, 20 и 50 атомов, убраных из объема.

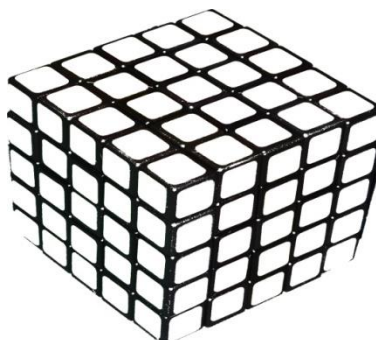


Рисунок 10–Структура GaAs 5\*5\*5

$$\frac{1}{8} \cdot 8 + 48 \cdot \frac{1}{4} + (16 \cdot 6 + 25 \cdot 6) \cdot \frac{1}{2} + 125 \cdot 4 + (16 + 25) \cdot 4 + 20 \cdot 5 + 20 \cdot 5 = 1000$$

Выше указано общее количество всех атомов в исследуемой системе.

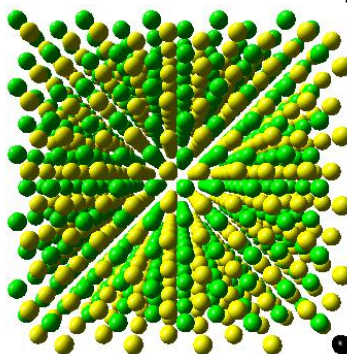


Рисунок 11 – Модель системы GaAs с вакансией (показано черным цветом)

На рисунке 11 представлена одна из моделей – изображена вакансия (в виде черного атома). На самом деле на том месте нет атома, черный цвет выбран для наглядности.

На рисунке 12 показаны атомы с максимальным координационным числом, равным 4. Желтым цветом обозначены атомы Ga, зеленым – атомы As.

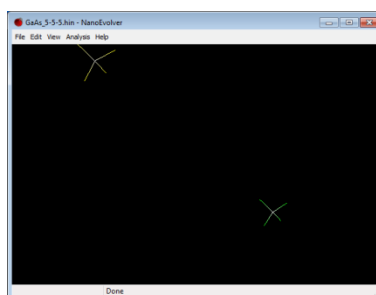


Рисунок 12– Графическое представление атомов Ga и As с КЧ =4

### 2.3 Компьютерное моделирование релаксационных процессов методом квантовой нанокинетики

Компьютерное моделирование релаксационных процессов наночастицы арсенида галлия (5\*5\*5) со структурными вакансиями осуществляется программой NanoEvolver методом квантовой нанокинетики. Исследование проводится посредством воздействия на наночастицы импульсного излучения.

Поочередно были загружены и исследованы структуры без вакансий и с ними (были убраны атомы из вершин, с ребер, с граней и из объема).

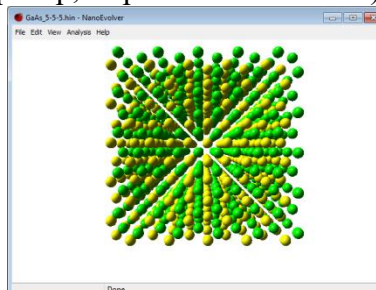


Рисунок 13 – Окно программы NanoEvolver с загруженной структурой GaAs (5\*5\*5)

Далее с помощью окна Edit вызывается команда Settings и устанавливаются необходимые параметры, полученные ранее, а именно: энергия связи, длина связи, частота нулевых колебаний. Также устанавливается температура, при которой будет

осуществляться оптимизация, на рисунке 14 представлено окно Settings установленными параметрами.

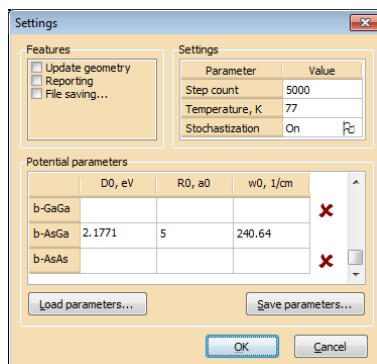


Рисунок 14 – Окно Settings установленными параметрами

Затем с помощью команды Evolve проводится оптимизация при указанных условиях.

Также были исследованы структуры без 10, 20 и 50 атомов. Все эти атомы были убраны из объема системы, так как именно такое расположение вакансий вызывает наибольшее изменение энергии.

Оптимизация всех структур была проведена согласно описанному выше алгоритму при двух температурах – 77 К и 298 К.

#### 2.4 Техника безопасности

При работе с компьютером необходимо строгое соблюдение техники безопасности, а именно – техники безопасности при работе с электроприборами.

##### 2.4.1 Требования безопасности, которые должны соблюдаться при работе с электроприборами

Перед началом работы с электроприборами необходимо:

- надеть спецодежду;
- проверить наличие индивидуальных средств защиты и защитных устройств, заземления в электроприборах, исправность в изоляции;
- проверить наличие средств пожаротушения.

Во время работы необходимо:

- вести работы при малых напряжениях, постоянно контролировать исправность изоляции, включать и выключать электроприборы сухими руками, держась за вилку;
- устанавливать электроприборы в стороне от огнеопасных жидкостей.

Запрещается:

- протирать электроприборы влажными тряпками;
- использовать для подключения электроприборов провод с поврежденной изоляцией или вообще без изоляции;
- оставлять без присмотра включенные электроприборы.

По окончании работы необходимо выключить электроприборы из сети, привести в порядок индивидуальные средства защиты [40].

##### 2.4.2 Действия при пожаре и несчастном случае

При возникновении пожара необходимо постараться ликвидировать очаг возгорания имеющимися средствами пожаротушения: асбестовым одеялом, песком, огнетушителями порошковыми.

При возгорании электроприборов необходимо отключить прибор от сети и сообщить о пожаре по телефону 01.

Если при пожаре возникают пострадавшие, то любое лицо, присутствующее при травме, должно немедленно оказать им помощь и вызвать скорую помощь по телефону 03 [40].

### 3 АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ ДАННЫХ

#### 3.1 Результаты расчета равновесных параметров связи методом нелокального функционала плотности

Используя метод нелокального функционала плотности для системы GaAs, были рассчитаны следующие параметры: энергия связи  $D_0$ , равновесное расстояние  $R_0$ , циклическая частота  $\omega_0$ [41], представленные в таблице 3.

Таблица 3 – Равновесные параметры связей димеров состава  $A^{III}B^V$  на примере Ga-As

$D_0, \text{eV}$	$R_0, a_0$	$\omega_0, 1/\text{cm}$
-2.1771	5,0	240,64

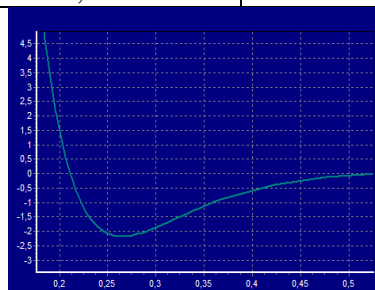


Рисунок 15–Поверхность потенциальной энергии взаимодействия атомов AsGa

### 3.2 Результаты компьютерного моделирования релаксационных процессов методом молекулярной механики

В работе проводилось исследование устойчивости наночастиц GaAs со структурными вакансиями (были убраны атомы из вершин, с ребер, с граней и из объема). Созданием дефектов в структуре были определены энергетические значения, характеризующие устойчивость системы.

В результате компьютерного моделирования наночастиц арсенида галлия со структурными вакансиями были получены структуры с разными значениями энергии связей.

Также с помощью данного метода были получены радиальные функции распределения исследуемых атомов.

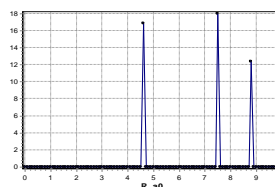


Рисунок 16 – Радиальная функция распределения атомов в исследуемой структуре до оптимизации

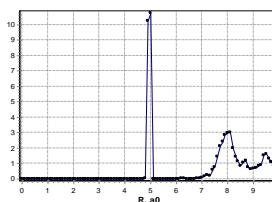


Рисунок 17– Радиальная функция распределения атомов в исследуемой структуре (без вакансий) после оптимизации

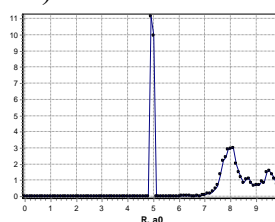


Рисунок 18– Радиальная функция распределения атомов в исследуемой структуре (без 2 атомов, убраных из вершин) после оптимизации

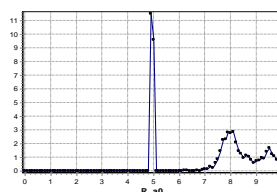


Рисунок 19 – Радиальная функция распределения атомов в исследуемой структуре (без 2 атомов, убранных с ребер) после оптимизации

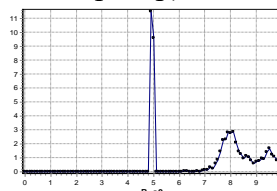


Рисунок 20 – Радиальная функция распределения атомов в исследуемой структуре (без 2 атомов, убранных с граней) после оптимизации

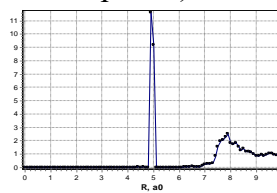


Рисунок 21 – Радиальная функция распределения атомов в исследуемой структуре (без 2 атомов, убранных из объема) после оптимизации

Таблица 4 – Энергия наночастиц GaAs с вакансиями

Структура GaAs	Состав	Количество связей	Энергия, кДж/моль
Без вакансий	1000 атомов: Ga(500) As(500)	1715	-360,19
Убран один атом из вершины	999 атомов: Ga(499) As(500)	1714	-360,35
Убран один атом из вершины	999 атомов: Ga(500) As(499)	1714	-360,34
Убраны два атома из вершин	998 атомов: Ga(499) As(499)	1713	-360,47
Убран один атом с ребра	999 атомов: Ga(499) As(500)	1713	-360,11
Убран один атом с ребра	999 атомов: Ga(500) As(499)	1713	-360,11
Убраны два атома с ребер	998 атомов: Ga(499) As(499)	1711	-360,04
Убран один атом с грани	999 атомов: Ga(499) As(500)	1713	-360,02
Убран один атом с грани	999 атомов: Ga(500) As(499)	1713	-360,07
Убраны 2 атома с граней	998 атомов: Ga(499) As(499)	1711	-360,07
Убран один атом из объема	999 атомов: Ga(499) As(500)	1711	-359,71
Убран один атом из объема	999 атомов: Ga(500) As(499)	1711	-359,64
Убраны 2 атома из объема	998 атомов: Ga(499) As(499)	1707	-359,15
Убраны 10 атомов из объема	990 атомов: Ga (495) As (495)	1675	-355,27
Убраны 20 атомов из объема	980 атомов: Ga (490) As (490)	1635	-350,47
Убраны 50 атомов из объема	950 атомов: Ga (475) As (475)	1515	-336,25

В таблице 4 представлены результаты расчетов энергии наночастиц арсенида галлия со структурными вакансиями и без них, включающие в себя значения энергии системы, состав, а также информацию о количестве связей. Полученные значения энергий изменяются незначительно (вследствие низкой концентрации вакансий). Устойчивость наночастиц арсенида галлия уменьшается с увеличением концентрации точечных дефектов.

Повышение концентрации вакансий приведет к более значительным изменениям энергии в системе GaAs. Таким образом, особый интерес представляют наночастицы с большей концентрацией вакансий. В качестве модельных, были взяты наночастицы с количеством вакансий 10, 20 и 50, находящимися в объеме кристалла. При увеличении концентрации вакансий происходит дестабилизация структуры с увеличением энергии наночастицы с  $-360$  кДж/моль до  $-336$  кДж/моль.

Как видно из рисунков, до оптимизации все наночастицы GaAs имеют три пика – соответствие трем координационным сферам. После оптимизации радиальная функция распределения, соответствующая наночастицам GaAs без вакансий, изменяется, происходит смещение первого пика вправо с позиции  $4,7 a_0$  на  $5,0 a_0$ , наблюдается понижение интенсивности. Также наблюдается смещение и резкое уменьшение интенсивности пиков 2 и 3 координационных сфер.

Радиальные функции распределения атомов в наночастице GaAs без 2 атомов на вершинах и ребрах очень схожи между собой. Так же, как и в случае GaAs без вакансий, здесь наблюдается смещение вправо первого пика, соответствующего первой координационной сфере, а также понижение интенсивностей всех трех пиков. Интенсивность первого пика (системы без 2 атомов на вершинах и ребрах) понижается. Второй и третий пики сливаются.

Поведение координационных сфер, соответствующих наночастицам GaAs без 2 атомов в объеме, заметно отличается. Происходит смещение вправо первого пика с положения  $4,5 a_0$  на  $5,0 a_0$ , а также уменьшается его интенсивность. Второй и третий пик сливаются, изменяя свое положение и интенсивность. Второй пик смещается из положения  $7,5 a_0$ , а третий из положения  $8,9 a_0$ , образуя один сложный широкий сигнал в области  $8,0 a_0$ . Таким образом, наблюдается трансформация координационных сфер.

При увеличении концентрации вакансий наблюдаются изменения в распределении атомов (рисунок 22):

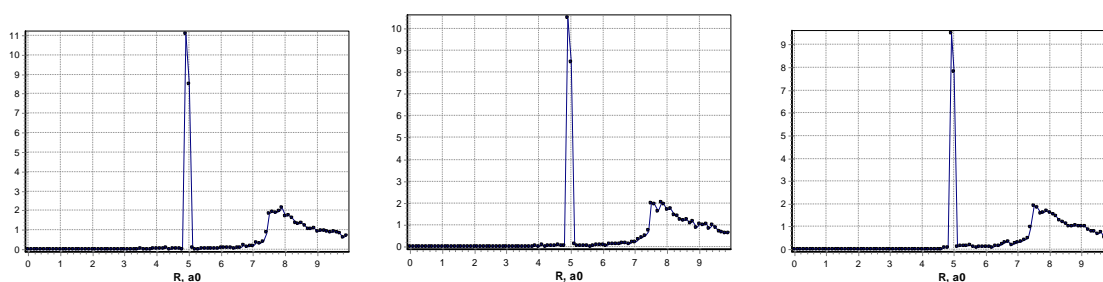


Рисунок 22 – Радиальные функции распределения атомов в наночастице при отсутствии 10, 20, 50 атомов из объема

Из рисунка 22 видно, что происходит перераспределение атомов, и происходит «размытие», встречаются единичные атомы на расстояниях  $5,2 - 7,0 a_0$ .

На рисунке 23 представлена зависимость энергии системы от количества атомов (атомы были убраны из вершин, с граней, с ребер и из объема в количестве 2, 10, 20 и 50). Видно, что с увеличением концентрации вакансий энергия также увеличивается, что говорит о дестабилизации структуры.



Рисунок 23 – Зависимость энергии системы от количества атомов

### 3.3 Результаты компьютерного моделирования релаксационных процессов методом квантовой нанокинетики

С помощью данного метода была исследована релаксация наночастиц арсенида галлия со структурными вакансиями при 77 К и 298 К. Результаты компьютерного эксперимента представлены в таблице 6

Исходя из данных таблицы бвидно, что энергия изменяется незначительно вследствие низкой концентрации вакансий. В связи с этим также были проведены расчеты энергии системы без 10, 20 и 50 атомов, убранных из объема. Время релаксации, то есть время выхода системы на плато – различно, оно зависит от температуры.

Таблица 5 – Показатели аттосекундного процессинга наночастицGaAs с вакансиями

СтруктураGaAs	$E_0$ , кДж/моль	$E_{77}$ , кДж/моль	$t_{77}$ , пс	$A_{77}$ , кДж/моль	$E_{298}$ , кДж/моль	$t_{298}$ , пс	$A_{298}$ , кДж/моль
Без вакансий	-360,19	-359,59	1,3 9	0,65	-357,74	1,0 1	2,84
Убраны 2 атома из вершин	-360,47	-360,38	1,3 2	0,68	-359,90	0,9 4	2,91
Убраны 2 атома с ребер	-360,50	-359,95	1,4 0	0,70	-358,72	0,9 4	2,72
Убраны 2 атома с граней	-360,26	-359,89	1,3 6	0,68	-358,86	0,9 8	2,80
Убраны 2 атома из объема	-359,15	-359,09	1,3 5	0,67	-356,27	0,8 7	2,73
Убрано 10 атомов	-355,27	-355,11	1,2 3	0,71	-354,59	0,8 2	2,73
Убрано 20 атомов	-350,47	-350,86	1,0 6	0,75	-350,52	0,6 9	2,96
Убрано 50 атомов	-336,25	-336,07	0,7 2	0,71	-333,53	0,6 3	3,10

Получены кинетические кривые, характеризующие изменение энергии в ходе процесса релаксации. Представлены объединенные кинетические кривые релаксации (при  $T = 0\text{K}, 77\text{K}, 298\text{K}$ ).

Также в ходе эксперимента были получены радиальные функции распределения атомов в исследуемых системах. Они характеризуются тремя пиками до оптимизации системы. После оптимизации структура пиков разрушается – пики второй и третьей координационной сферы сливаются.

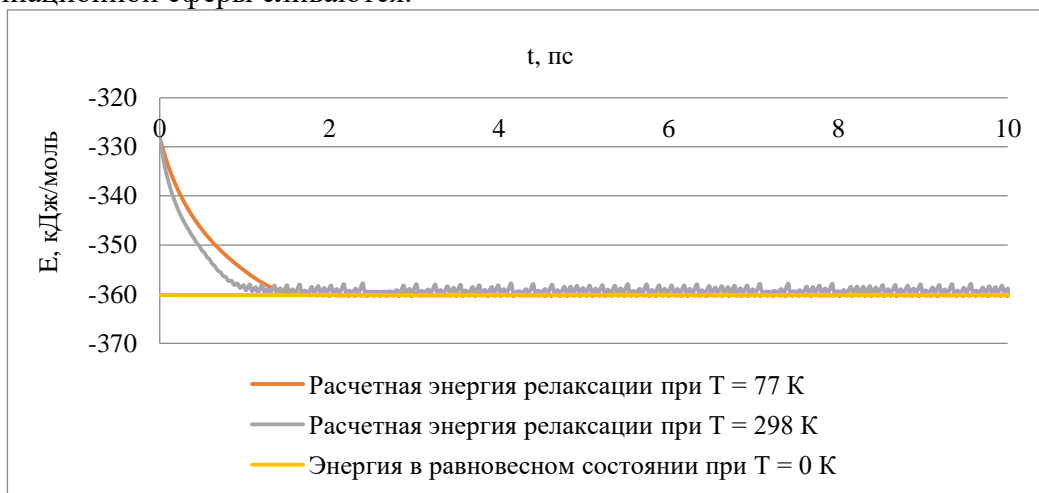


Рисунок 24 а – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без вакансий

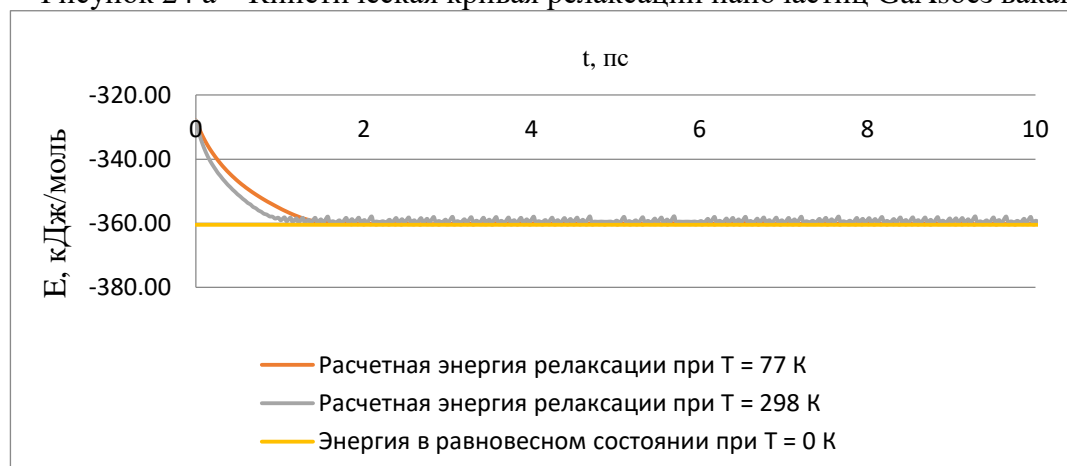


Рисунок 24 б – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 2 атомов, убранных из вершин

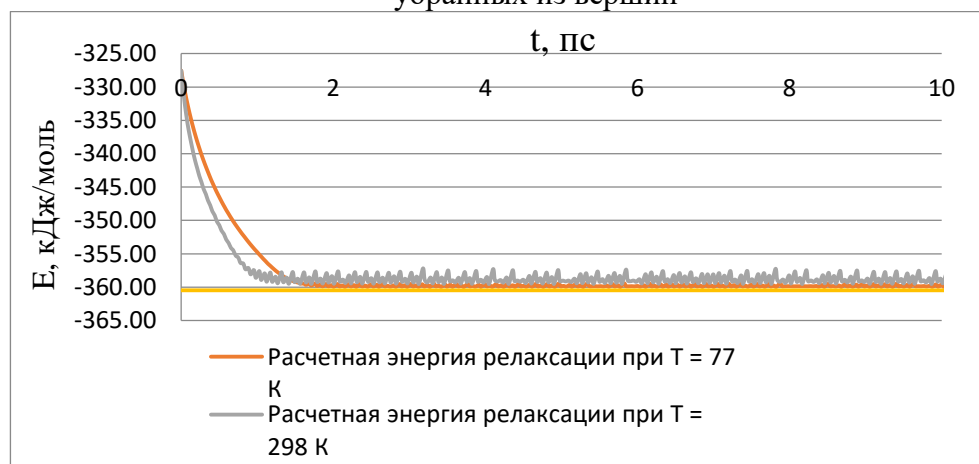


Рисунок 24 в – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 2 атомов, убранных с ребер



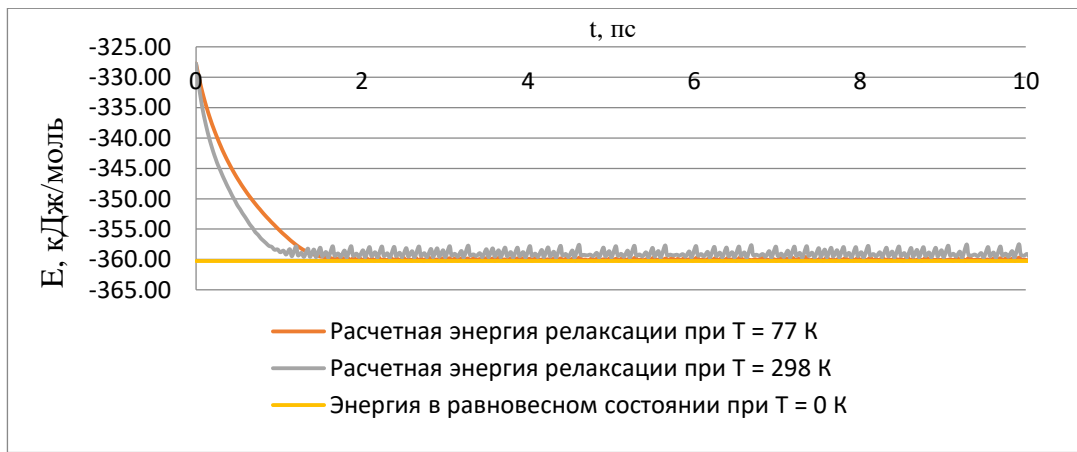


Рисунок 24 г – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 2 атомов, убранных с граней

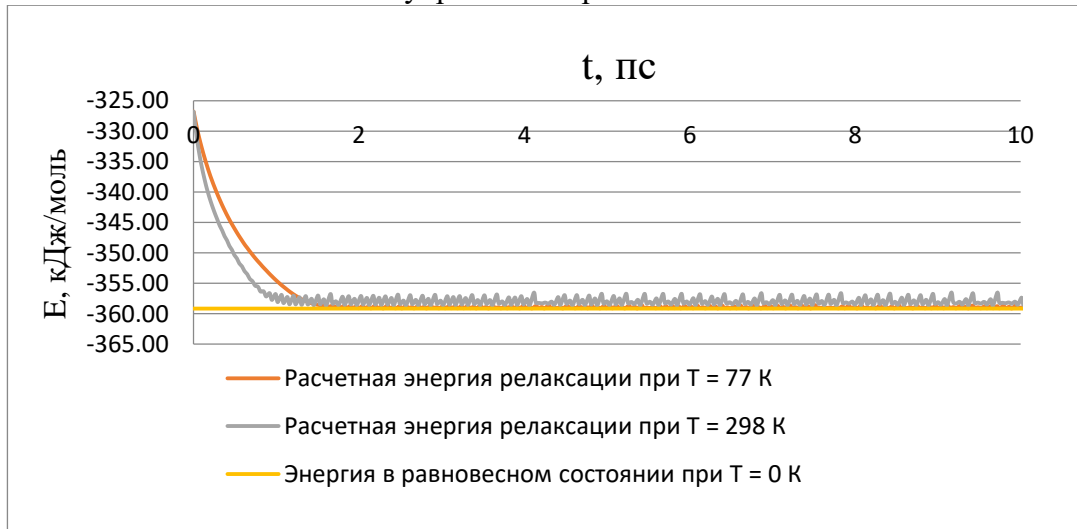


Рисунок 24 д – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 2 атомов, убранных из объема

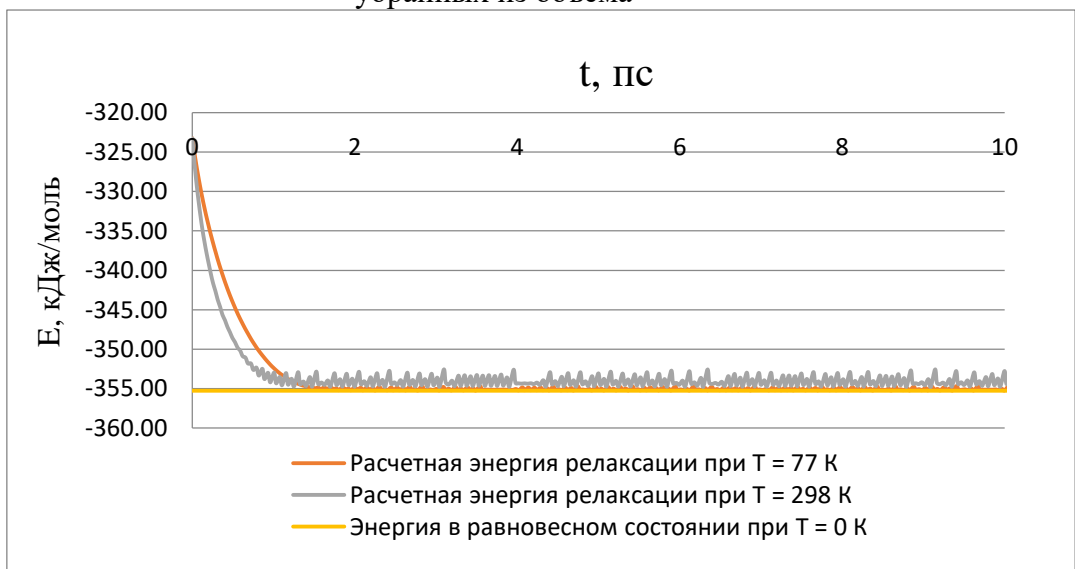


Рисунок 25 а – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 10 атомов, убранных из объема

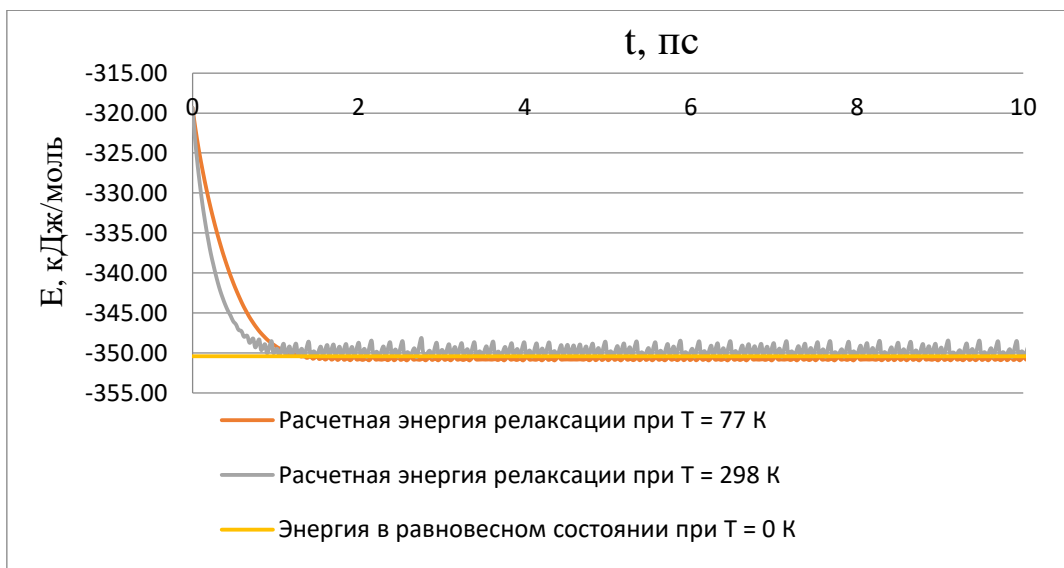


Рисунок 25 б – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 20 атомов, убранных из объема

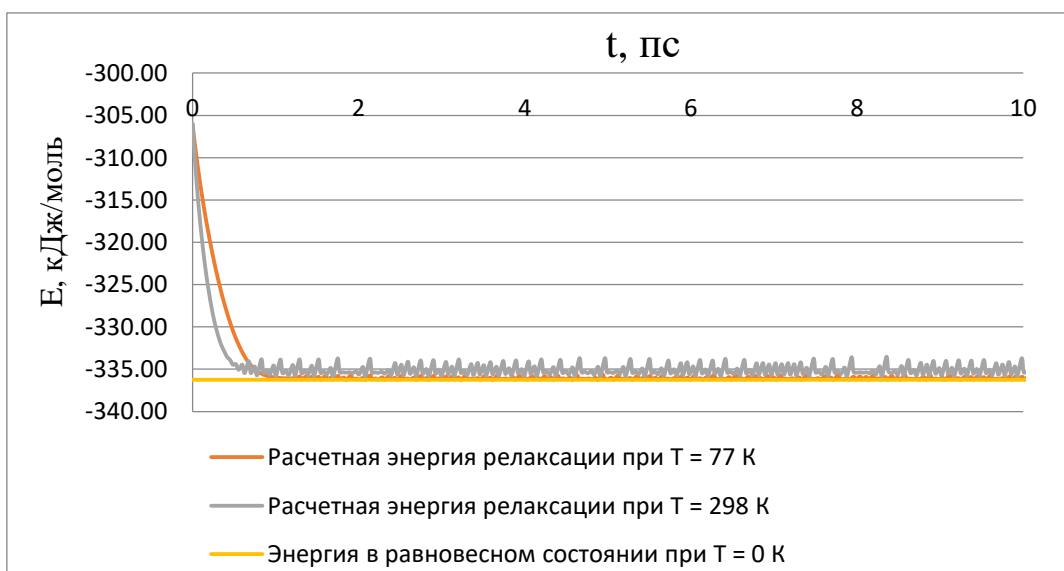


Рисунок 25 в – Кинетическая кривая релаксации наночастиц GaAs без 50 атомов, убранных из объема

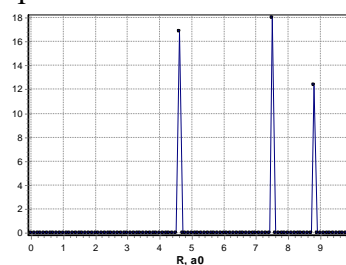


Рисунок 26 – Радиальная функция распределения атомов в GaAs без 2 атомов, убранных из вершин до оптимизации

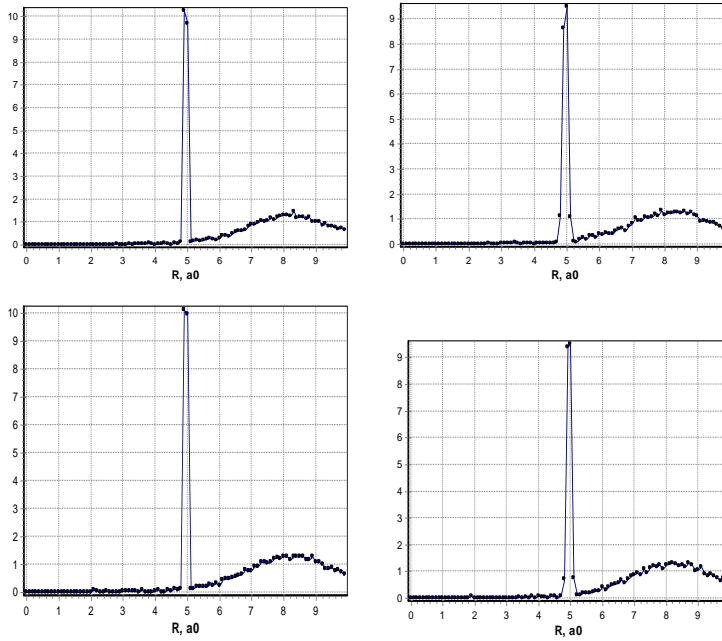


Рисунок 27 – Радиальные функции распределения атомов в GaAs(без вакансий, без 2 атомов, убранных из вершин, с ребер, с граней и из объема) после оптимизации при 77 К

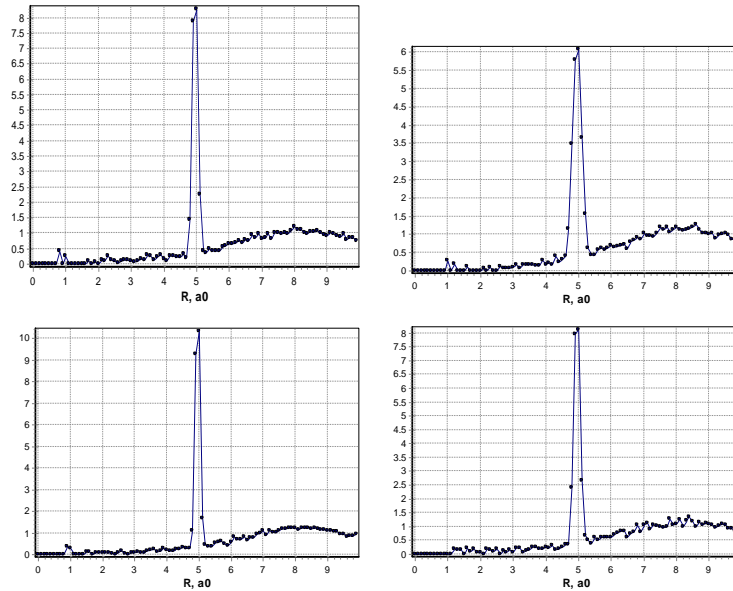


Рисунок 28 – Радиальные функции распределения атомов в GaAs(без вакансий, без 2 атомов, убранных из вершин, с ребер, с граней и из объема) после оптимизации при 298 К

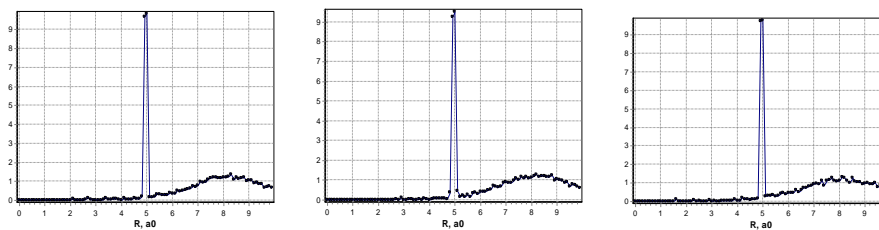


Рисунок 29 – Радиальные функции распределения атомов в GaAs (без 10, 20 и 50 атомов, убранных из объема) после оптимизации при 77 К

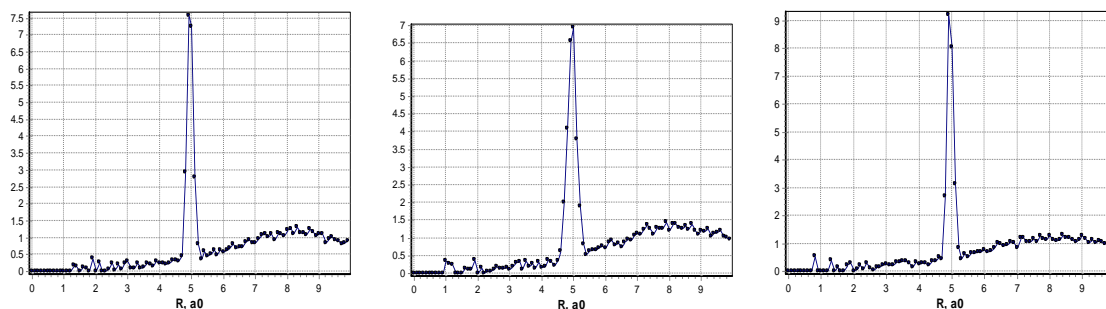


Рисунок 30 – Радиальные функции распределения атомов в GaAs(без 10, 20 и 50 атомов, убранных из объема) после оптимизации при 298 К

## ВЫВОДЫ

1. Построены модели наночастицы арсенида галлия и наночастицы арсенида галлия со структурными дефектами (вакансиями).
2. Методом нелокального функционала плотности были получены значения парных корреляционных потенциалов атомов в кристаллической наночастице Ga-As.
3. Методом молекулярной механики была исследована устойчивость наночастиц GaAs со структурными вакансиями. Показано снижение устойчивости с ростом концентрации вакансий. Выявлена незначительная относительная дестабилизация системы при увеличении координационного числа атома, на месте которого образуется вакансия. Дефекты, расположенные в объеме системы, вносят наибольший дестабилизирующий вклад.
4. Методом квантовой нанокинетики было показано, что повышением температуры от 77 К до 298 К средняя энергия системы изменяется в зависимости от концентрации вакансий на 1 кДж/моль (в случае 990 атомов) и 3 кДж/моль (в случае 950 атомов).

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Федоров П. И. Галлия арсенид // Химическая энциклопедия: в 5 т. / И. Л. Кнунянц (гл. ред.). — М.: Советская энциклопедия, 2001 г. Т. 1: С. 481. – 623 с.
2. Давыдов А. С. Квантовая механика. 3-е изд., стер. — СПб.: 2011 г. — 704 с.
3. Боум А. Квантовая механика: основы и приложения. М.: Мир, 1999 г. – 720 с.
4. Goetzberger A., Hebling C., Schock H.-W., Photovoltaic materials, history, status and outlook // Mater. Sci. Eng. R40–2003.—P.1–46.
5. Stroppa A., Peressi M. Structural properties and stability of defected ZnSe/GaAs(0 0 1) interfaces / A.Stroppa, M.Peressi // Computational Materials Science. – 2005. – №33. – P. 256–262.
6. Fisher J., Bahl I. Gallium Arsenide IC Applications Handbook. 1<sup>st</sup>ed. Academic Press: 2002. – P. 369.
7. Мильвидский М.Г., Пелевин О.В., Сахаров Б.А., Физико-химические основы получения разлагающихся полупроводниковых соединений (на примере арсенида галлия) // М.: Мир, 2007. – С.238.
8. Родерик Э.Х., Контакты металл-проводник // М.: Радио и связь, 2006. – С.208
9. Зюзин Ю.Б., Обзор изобретений «Полупроводниковые приборы и интегральные схемы», Ч. 1-3 / Аналитические обзоры / Scitechlibrary.com/, 2003 г.
10. Riza D., Caldiran Z. Schottky diode performance of an Au/Pd/GaAs device fabricated by deposition of monodisperse palladium nanoparticles over a p-type GaAs substrate / D.Riza, Z.Caldiran // Materials Science in Semiconductor Processing. – 2014. – №27. – P. 163–169.

11. Escano M., Nguyen Q. Does GaAs bulk lattice really expand due to defects in the low concentration regime? / M. Escano, Q. Nguyen // *Solid State Communications*. – 2018. – №13. – P. 316–317.
12. Elsayed M., Krause-Rehberg R. As vacancy complex Zn-diffused GaAs: Positron lifetime spectroscopy study / M. Elsayed, R. Krause-Rehberg // *ScriptaMaterialia*. – 2017. – №131. – P. 72–75.
13. Kiessling F., Rudolph R. Vacancy-type defects in boron-reduced V Cz GaAs crystals / F. Kiessling, R. Rudolph // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2008. – № 2 (3). P. 289 – 293.
14. Шалимова К.В. Физика полупроводников / К.В. Шалимова. 4-е издание – М.: Энергия, 1971. – С.311.
15. Ramdani M., Fontaine C., Record high-aspect-ratio GaAs nano-grating lines grown by Hydride Vapor Phase Epitaxy (HVPE) // *Journal of Crystal Growth*, –2013. –P.93–98.
16. Miles R., Photovoltaic solar cells: Choice of materials and production Methods // *Vacuum*, –2006. –P.1090–1097.
17. Черняев В.Н., Кожитов Л.В. Технология получения эпитаксиальных слоев арсенида галлия и приборы на их основе / В.Н. Черняев, Л.В. Кожитов. – М. Энергия, 1974. – С.232
18. Statler R., Walker D., Richard L., Electron radiation damage in gallium arsenide solar cells // *Solar Cells*, –2007. – P.69–77
19. Минкин В. И., Симкин Б.Я. Теория строения молекул : учеб. пособие для ун-тов / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, – М.: Высш. шк., 1979. – С. 407.
20. Гудымович Е.Н. Химия и термодинамика полупроводниковых соединений / Е.Н. Гудымович, –Томск : Изд-во Томск.ун-та, 1981. – С. 109.
21. Fetzer C., Liu X., Chang J., Progress in large area organometallic vapor phase epitaxy for III–V multijunction photovoltaics // *Journal of Crystal Growth*, 2012 – P.180–184.
22. Вяткин А.П., Вилисов А.А. Развитие физико-технологических основ создания полупроводниковых приборов / А.П. Вяткин, А.А. Вилисов // *Вестник Томского университета*, – 2005. – №8. – С. 33–39.
23. Криворотов Н.П. Электрические свойства и надежность приборов на основе GaAs / Н.П. Криворотов // *Вестник Томского университета*, – 2009. – №11. – С. 43–48.
24. Оксанич А.П., Притчин С.Э. Тербан В.А. Разработка устройств и систем выращивания слитков арсенида галлия для изделий микро-, нано электроники и фотовольтаики / А.П. Оксанич, С.Э. Притчин, В.А. Тербан // *Вестник Нац. тех. ун-та Украины*. – 2013. – №8. – С. 40–48.
25. Лаврентьева Л.Г., Вилисова М.Д. Газофазовая эпитаксия арсенида галлия / Л.Г. Лаврентьева, М.Д. Вилисова // *Вестник Томского гос. ун-та*. – 2005. – №8. – С. 76–82.
26. Коковин Г.А., Федорова Т.В. Термодинамический анализ процессов выращивания арсенида галлия из газовой фазы / Г.А. Коковин, Т.В. Федорова. Т.1 Новосибирск: Наука, 1998. С. 105-120.
27. Дмитриев В.А., Штейнгарт А.П. Исследование эпитаксиальных структур арсенида галлия / В.А. Дмитриев, А.П. Штейнгарт // *Вестник Новгородского гос. ун-та им. Ярослава Мудрого*. – 2003. – №23. – С. 12–16.
28. Мирющенко Н.И., Проскуряков А.В. Расчет выращивания подложки методом бестигельной зонной плавки / Н.И. Мирющенко, А.В. Проскуряков // *Символ науки*. – 2016. – №3. – С. 22–27.
29. Султанов А.О., Каргин Н.И. Получение эпитаксиальных пленок полупроводниковых соединений на пористых подложках / А.О. Султанов, Н.И. Каргин //

Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Технические науки. – 2013. – №11. – С. 121–125.

30. Jonson V., Winter M. Application of gallium arsenide / V. Jonson, M. Winter // Journal of Science. – 2014. – №12. – P. 101–107.

31. Pollo F., Swerty-Till R. Application of semiconductor materials / F. Pollo, R. Swerty-Tell // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 2010. – № 12. P. 187 – 193.

32. Messei N., Aida M., Numerical simulation of front graded and fully graded AlGaAs/GaAs solar cell // Optik - International Journal for Light and Electron Optics, – 2015. – P.432–435

33. Hidouri T., Samia N., Faouzi S. Experimental and theoretical study of novel VGaAs/GaAs single quantum well for photonic applications // Vacuum. – 2018. №4. –P. 134–139.

34. Наумов А.В. Обзор мирового рынка арсенида галлия / А.В. Наумов // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. – 2005. – №2. – С. 20–25.

35. Хлудков С.С. О практическом применении арсенида галлия, легированного переходными металлами / С.С. Хлудков // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – №8-2. – С. 199–122.

36. Ларичкин Ф.Д., Череповицын А.Е., Новосельцева В.Д. Состояние и перспективы российского и мирового рынка галлия / Ф.Д. Ларичкин, А.Е. Череповицын, В.Д. Новосельцева // Известия уральского государственного горного университета. – 2017. – №4 (48). – С. 108–114.

37. Киселев В.К., Скупов В.Д. Новые области применения радиационных технологий в производстве полупроводниковых приборов / В.К. Киселев, В.Д. Скупов // Вестник нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. Серия: физика твердого тела. – 1998. – №2. – С. 125–130.

38. Yahia I.S., Farag A.A.M., Jafer R. Electrical, photovoltaic and photosensitivity characteristics of p-ZnTe:N/CdTe:Mg/n-CdTe:I/GaAs for photodiode applications / I.S. Yahia, A.A.M. Farag, R. Jafer // Materials science in Semiconductor Processing. – 2017. №8. –P. 33–40.

39. Vigneron P.B., Joint F., Isac N. Advanced and reliable GaAs/AlGaAs ICP-DRIE etching for optoelectronic, microelectronic and microsystem applications / P.B. Vigneron, N. Isac // Microelectronic Engineering. – 2018. №2. – P. 42–50.

40. Сборник инструкций по охране труда химического факультета – Барнаул.: Изд-во АлтГУ. – 1997. – 23 с.

41. Многоуровневое строение, физико-химические и информационные свойства вещества / С. А. Безносюк, А. И. Потекаев, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская, Л. В. Фомина. – Томск : Изд-во НТЛ, – 2005 – С. 72.

## 6. Критерии оценивания

### Оценивание содержания отчета

4-балльная шкала	Показатели	Критерии
Отлично	1. Структурированность и полнота отражения выполнения индивидуального задания в отчете. 2. Правильность отражения выполнения индивидуального задания в	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, студент проявил высокий уровень самостоятельности и творческий подход к его выполнению и оформлению отчета, который характеризуется грамотностью изложения и полным

	отчете. 3. Своевременность и последовательность выполнения индивидуального задания и подготовки отчета.	соответствием предъявляемым требованиям.
Хорошо	4. Творческий подход студента при выполнении индивидуального задания и оформления отчета.	Индивидуальное задание выполнено в полном объеме, имеются отдельные недостатки в оформлении отчета по представленному материалу.
Удовлетворительно	5. Соответствие оформления отчета стандартам и правилам программы практики.	Задание в целом выполнено, однако имеются недостатки при выполнении в ходе практики отдельных разделов (частей) задания, имеются замечания по оформлению собранного материала в отчете.
Неудовлетворительно		Задание выполнено лишь частично, имеются многочисленные замечания по оформлению собранного материала в отчете.