



**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского
Российской академии наук
(ИОХ РАН)**

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИОХ РАН
академик
М.П. Егоров
« 27 июля » 2018 г.

**Рабочая программа
научно-исследовательской работы
аспирантов ИОХ РАН
подготовка кадров высшей квалификации
Направление подготовки
04.06.01 – ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**

Направленность (профиль)
02.00.03 Органическая химия
02.00.04 Физическая химия
02.00.10 Биоорганическая химия
02.00.15 Кинетика и катализ

Москва
2018 г.

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 № 869.

Разработчики:

к.х.н. Свитанько И.В.

Программа принята на заседании Ученого совета ИОХ РАН
Протокол № 6 от « 26. 06. 2018 г.

Ученый секретарь:

Кандидат химических наук  И.К. Коршевец

1. Общая характеристика

Научно-исследовательская работа (НИР) относится к вариативной части ОПОП.

НИР и подготовка научно- квалификационной работы проводится в течение всего периода обучения, ведется в соответствии с индивидуальным планом аспиранта и выполняется в отдельные периоды обучения одновременно с учебным процессом и педагогической практикой. По НИР предусматривается промежуточная аттестация в форме устного выступления на семинаре, Ученом совете ИОХ РАН или конференции.

Выполненная НИР завершается написанием научно- квалификационной работы, которая должна соответствовать критериям, установленным для научно-квалификационной работы (диссертации) на соискание ученой степени кандидата технических наук.

Порядок представления и защиты диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, а также требования к ее содержанию и оформлению регламентируются соответствующими положениями Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации.

1.1. Цель и задачи

1.1. Целью выполнения НИР является приобретение, развитие и применение в ходе работы над диссертацией профессиональных знаний по избранному направлению подготовки и направленности аспирантского обучения.

1.2. Указанная цель достигается решением следующих задач:

- выполнение анализа состояния проблемы, связанной с темой диссертации, в профильной области техники и технологии;
- освоение теоретических положений, описывающих проблему;
- выбор, изучение и применение в рамках профильного направления методов и средств расчетного моделирования процессов и явлений в объекте исследования;
- освоение подходов и учет мировых тенденций развития данной области науки, обеспечивающих высокий технико-технологический уровень, новизну и надежность разрабатываемых алгоритмов и комплексов программ;
- получение навыков применения современных методов и средств испытаний, а также методов анализа их результатов.

1.2. Компетенции, приобретаемые аспирантами в результате выполнения НИР

- Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- Способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки (УК-2);
- Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);

- способность приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-2).
- владение основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования веществ и реакций (ПК-4);

2. Место НИР в структуре основной профессиональной программы послевузовского профессионального образования

НИР проводится в течение всего периода обучения..

3. Структура и содержание НИР

3.1. Структура НИР

Общая за период обучения (4 года очная) трудоемкость НИР составляет 135 зачетных единиц.

3.2. Содержание НИР

| № п/п | Содержание |
|-------|---|
| 1 | Обзор литературы и баз данных |
| 2 | Теоретическая часть: изучение теоретических основ - алгоритмов расчетов энергетических, электрических и стерических характеристик молекул, конгломератов и поверхностей; - номенклатуры и стереохимии органических соединений; - механизмов органических реакций - механизмов органического катализа - основ планирования эксперимента в органической химии с использованием онлайн-баз данных периодических изданий, онлайн- и офлайн-коллекций органических, элементоорганических соединений, катализаторов металлокомплексного, гетерогенного и гомогенного катализа. |
| 3 | Изучение и разработка молекулярно-механических моделей синтеза и катализа (программного обеспечения, алгоритмов, программ и т.п.). |
| 4 | Аналитические методы исследования результатов химических реакций и выполнение расчетов в органической химии. |
| 5 | Проведение и обработка результатов эксперимента. |
| 6 | Разработка и защита положений актуальности, научной и технической новизны, патентный поиск, проработка патентной чистоты полученных результатов. |
| 7 | Публикации статей и выступления с докладами на конференциях и конкурсах. Оформление научно- квалификационной работы и диссертации. |

4. Описание разделов

| № п/п | Содержание | Описание |
|-------|---|--|
| 1 | Обзор литературы и баз данных | Нахождение, выбор и анализ литературных, справочных, диссертационных, патентных и иных, включая электронные издания источников, отражающих состояние проблемы, а также степень ее разработки. Итогом обзора является постановка цели и задач текущего исследования. |
| 2 | <p>Теоретическая часть: изучение теоретических основ</p> <ul style="list-style-type: none"> - алгоритмов расчетов энергетических, электрических и стерических характеристик молекул, конгломератов и поверхностей; - номенклатуры и стереохимии органических соединений; - механизмов органических реакций - механизмов органического катализа - основ планирования эксперимента в органической химии с использованием онлайн-баз данных периодических изданий, онлайн- и офлайн-коллекций органических, элементоорганических соединений, катализаторов металлокомплексного, гетерогенного и гомогенного катализа. | Выбор, приложение из лит. источников (или самостоятельные формулировки) основных зависимостей, описывающих исследуемый процесс. Обоснование задания граничных условий, решение (при необходимости) оптимизационных задач. Анализ и прогнозирование поведения веществ в условиях химической реакции. |
| 3 | Изучение и разработка молекулярно-механических моделей синтеза и катализа (программного обеспечения, алгоритмов, программ и т.п.). | Создание моделей и алгоритмов (переход от реального объекта к молекулярному моделированию, оценивание влияния различных факторов и т.п.), описывающих динамику исследуемых химических реакций, установление актуальности изучаемой проблемы, формулировка цели и задачи исследования. Описание полученной модели свойства, течения реакции или ее поверхности потенциальной энергии. |
| 4 | Аналитические методы исследования результатов химических реакций и выполнение расчетов в органической | Аналитические вычисления в химии. Осуществление оптимизационных процедур при решении исследуемых |

| | химии. | задач. |
|---|--|--|
| 5 | Проведение и обработка результатов эксперимента. | Проведение направленного химического эксперимента согласно ранее сформулированным условиям и молекулярным моделям, схемам и расчетам. Анализ результатов химического эксперимента и сопоставление их с литературными данными. Обработка полученных результатов эксперимента. Испытание полученных соединений на проявление заранее заданных свойств. |
| 6 | Разработка и защита положений актуальности, научной и технической новизны, патентный поиск, проработка патентной чистоты полученных результатов. | Составление заявок на предполагаемые изобретения, сопровождение экспертной проверки материалов заявок. Патентование разработанных методов синтеза и полученных соединений. |
| 7 | Публикации статей и выступления с докладами на конференциях и конкурсах. Оформление научно-квалификационной работы и диссертации. | Написание статей и тезисов докладов. Работа с редакциями и рецензентами. Участие в научно-технических конференциях, а также выступления с плановыми докладами о результатах работы над диссертацией на заседаниях Ученого совета и его секций. Написание, редактирование и внесение текущих правок в текст квалификационной работы и диссертации по ходу ее выполнения. Окончательное оформление диссертации для подготовки ее сдачи в Совет. Разработка иллюстративно-графического материала для ее презентации и защиты. |

4.1. Практические (семинарские) занятия – не предусмотрены.

4.2. Организация текущего и промежуточного контроля знаний:

4.2.1. Контрольные работы – не предусмотрены.

4.2.2. Вопросы для промежуточного тестирования – не предусмотрены.

4.3 Самостоятельная работа

Основной формой деятельности аспирантов при выполнении научно-исследовательской работы и подготовки диссертации на соискание ученой степени кандидата наук является самостоятельная работа с консультацией у руководителя и обсуждением основных разделов: целей и задач исследований, а также научной и практической значимости теоретических и экспериментальных исследований, полученных результатов.

4.3.1 Поддержка самостоятельной работы

Все аспиранты имеют доступ (с компьютеров библиотеки ИОХ РАН) к следующим электронным базам данных:

- Электронные ресурсы Библиотеки естественных наук РАН (БЕН)
- Доступ к полным текстам статей из журналов издательства "Эльзевир" на платформе ScienceDirect: <http://info.sciencedirect.com/>
- Научная электронная библиотека <http://elibrary.ru>
- Рефераты и полные тексты статей из журналов, книги, книжных серий, электронных ссылок научных издательств: - Springer Verlag <http://springerlink.com>
- Chemical Abstracts <http://chemabs.cas.org>
- The Royal Society Of Chemistry <http://www.rsc.org>
- American Chemical Society <http://pubs.acs.org>

4.3.2 Тематика рефератов – не предусмотрены. Промежуточный контроль - проводится в виде собеседования с руководителем и ежегодных отчетов на аттестационной комиссии с утверждением итогов Ученым советом (секцией Ученого совета) ИОХ РАН.

5. Образовательные технологии

В процессе выполнения НИР аспиранты имеют возможность использовать все формы получения и закрепления знаний, а также приобретения опыта их представления, используемые на кафедре:

- учебно-методическую литературу по профильным дисциплинам;
- электронные учебные издания (ЭУИ) и онлайн базы данных (ОБД);
- конспекты лекций (по согласованию и предоставлению научного руководителя);
- описания расчетных программ, экспериментального и аналитического лабораторного оборудования;
- наглядные пособия;
- использование (в том числе модернизация и отладка) лабораторно-технического, испытательного; научно-исследовательского оборудования и приборов.
- Выполняя НИР, аспиранты имеют дополнительную возможность приобретать профессиональные компетенции путем:
- работы в научных всех семинарах ИОХ РАН, научных школ или организаций по теме своей работы;
- участия в научных конференциях, конкурсах и школах;
- выполнения работ в рамках госконтрактов; грантов, хозяйственных договоров;
- участия в конкурсах заявок на получение грантов на проведение НИР или в конкурсах работ молодых ученых и специалистов;
- подготовки статей, тезисов докладов, заявок на предполагаемые изобретения; написания разделов отчетов о НИР в рамках хоздоговорной тематики.
- участия в международных программах и проектах по профилю подготовки;

6. Оценочные средства текущего контроля выполнения НИР

Основным средством оценки состояния выполнения НИР является индивидуальный план аспиранта.

Формой текущего контроля соответствия плановых и реальных показателей выполнения НИР является аттестация аспирантов, проводимая два раза в год.

Оценке состояния выполнения НИР подлежат:

- обоснование выбора направления и темы диссертационной работы (на первом году обучения);
- промежуточный доклад аспиранта о результатах выполнения диссертации;
- итоговый (предзащита) доклад аспиранта о квалификационной и/или диссертационной работе.
- вопросы аспиранту и научному руководителю со стороны членов Ученого совета или секции Ученого совета) и членов комиссии по аттестации включают в себя:
- обоснование актуальности и соответствия профильному направлению (направленности) темы научной работы;
- обоснованность выбора научно-методических подходов и средств для решения научно-технической проблемы;
- наличие признаков научной новизны и практической полезности ожидаемых результатов работы;
- достаточность количества и уровня составляющих апробацию публикаций, отражающих суть и содержание диссертационной работы;
- наличие элементов защиты прав интеллектуальной собственности в результатах работы;
- возможные риски незавершения работы в указанные индивидуальным планом сроки и пути решения этой проблемы.

7. Учебно-методическое обеспечение НИР

7.1. Основная литература:

1. Болдин А.П. Основы научных исследований: Учебник/А.П.Болдин, В.А.Максимов, - М.: Академия, 2012.-336 с.
2. Карпов А.С., Карпов В.А. Практическое пособие для аспирантов и соискателей: (как поступить в аспирантуру, как написать диссертацию, автореферат, научную статью, как подготовиться к защите и защитить диссертацию)/.-2-е изд., перераб.- М.: Науч. технологии, 2014.-265с.
 3. Близнац И. А., Леонтьев К. Б. Авторское право и смежные права: учебник / Близнац И. А., Леонтьев К. Б.; ред. Близнац И. А. - М. : Проспект, 2010. - 416 с.

7.2. Дополнительная литература:

1. Костомаров В.Г. О языке диссертаций//Бюллетень ВАК.-2000.-№2.-С.1-4.