ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИРКУТСКИЙ ИНСТИТУТ ХИМИИ им. А.Е. ФАВОРСКОГО
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УТВЕРЖДАЮ
Директор
_____ д.х.н. А.В. Иванов
«07» марта 2022 г.

ПРОГРАММА
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЫ

Шифр и наименование области науки:
1. Естественные науки

Шифр и наименование группы научных специальностей:
1.4. Химические науки

Шифр и наименование научных специальностей:
1.4.3. Органическая химия
1.4.4. Физическая химия
1.4.7. Высокомолекулярные соединения
1.4.8. Химия элементоорганических соединений

Иркутск
2022

Рабочая программа составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов), утвержденными Приказом Минобрнауки России от 20.10.2021 № 951 и Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), утвержденным Постановлением Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122

Рабочая программа составлена начальником отдела аспирантуры Розенцвейг О.М.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА РАССМОТРЕНА И ОДОБРЕНА на заседании Ученого совета ИрИХ СО РАН (Протокол № 2 от «28» февраля 2022 г.)

1. Цели и задачи научно-исследовательской работы

Целью научно-исследовательской работы (далее – НИР) является формирование у аспирантов способности самостоятельно планировать и проводить научные исследования, связанные с решением сложных профессиональных задач, что позволит подготовить и представить к защите диссертацию на соискание ученой степени кандидата наук.

Задачи:

- закрепление и углубление знаний теоретических и методологических основ химии;
- развитие способности к критическому анализу и оценке современных научных достижений в области химии и смежных наук;
- формирование способности ставить и решать инновационные задачи в области химии, связанные с получением новых веществ, определением их строения и реакционной способности, возможных путей практического использования на основе глубоких фундаментальных и специальных знаний;
- развитие умения самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для развития фундаментальных и прикладных областей химической науки, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике;
- формирование навыков оформления результатов научных исследований в виде публикаций (статей, патентов, докладов, тезисов и т.п.), в том числе в рецензируемых изданиях, а также в изданиях, индексируемых в международных базах данных;
- формирование навыков разработки, реализации и управления научными проектами;
- развитие умения работы в научном коллективе;
- подготовка и оформление диссертации на соискание учёной степени кандидата наук.

2. Место научно-исследовательской работы в структуре программы аспирантуры

Научная деятельность аспиранта, направленная на подготовку диссертации к защите; подготовка публикаций, в которых излагаются основные результаты диссертации, в рецензируемых научных изданиях; подготовка заявок на получение патентов на изобретения; апробация результатов работы на конференциях; подготовка отчетов для промежуточной аттестации; подготовка материалов для последующего представления на защите являются основными видами деятельности обучающихся в аспирантуре ИрИХ СО РАН.

НИР относится к научному компоненту (Раздел 1) программ аспирантуры по научным специальностям:

- 1.4.3. Органическая химия;
- 1.4.4. Физическая химия;
- 1.4.7. Высокомолекулярные соединения;
- 1.4.8. Химия элементоорганических соединений.

НИР реализуется с первого по четвертый год обучения.

3. Требования к результатам научно-исследовательской работы

По итогам выполнения НИР аспиранты должны:

Знать:

- методологические проблемы, возникающие при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
- методологию научных исследований в области химических наук, основы планирования эксперимента, формы представления результатов исследований;
- технические и инженерные решения основных задач исследовательской деятельности в соответствующей профессиональной области;
- базовые методы исследования в области органической химии;
- понятия и законы в своей профессиональной области и современные направления её развития.

Уметь:

- формулировать цели и задачи научных исследований на основе результатов поиска, обработки и анализа научно-технической информации;
- анализировать, обобщать и публично представлять результаты выполненных научных исследований;
- выполнять информационный поиск необходимой научно-технической литературы, осуществлять правовую защиту результатов интеллектуальной деятельности;
- самостоятельно формулировать цель проекта и задачи для ее достижения;
- разрабатывать план реализации проекта, в том числе запланировать необходимые ресурсы и оценить возможные риски;
- применять методы профилактики и ликвидации возможных нестандартных ситуаций в своей профессиональной деятельности;
- оптимизировать и рационализировать технологические режимы работы оборудования в лаборатории химического профиля;
- оценивать материал с учётом знаний в области химических наук.

Владеть навыками:

- организации и проведения фундаментальных и прикладных научных исследований в области химических наук;
- построения причинно-следственных связей между экспериментальными и теоретическими данными;
- организации проведения экспериментов и испытаний, проведения обработки и анализа результатов;
- разработки новой научно-технической, конструкторской и технологической документации, написания диссертации на соискание ученой степени кандидата наук;
- использования стандартного оборудования и приборов для проведения исследований в области химии.

4. Сроки и продолжительность научно-исследовательской работы

Таблица 4.1. Сроки и продолжительность НИР аспиранта

Курс	Семестр	Форма промежуточной аттестации	Количество				
			З.Е.	Недель	Часов		
					По З.Е.	Самостоятельная работа	Контроль
1	1	Зачет	21	14	756	720	36
	2	Зачет	28	18 2/3	1008	972	36
2	3	Зачет	21	14	756	720	36
	4	Зачет	30	20	1080	1044	36
3	5	Зачет	15	10	540	504	36
	6	Зачет	36	24	1296	1260	36
4	7	Зачет	27	18	972	936	36
	8	Зачет	29	19 1/3	1044	1044	0
Сводные данные:		Зачет	207	138	7452	7200	252

Для обеспечения самостоятельной НИР научный руководитель аспиранта совместно с обучающимся составляет план работы на каждый семестр; дает консультации по подбору и изучению литературы по теме исследования, освоению необходимых методик проведения лабораторных экспериментов; осуществляет контроль за правильностью и сроками проведения исследований; оценивает работу обучающегося; дает рекомендации по устранению недостатков.

5. Содержание научно-исследовательской работы

НИР реализуется согласно индивидуальному плану научной деятельности аспиранта, включающему в себя примерный план выполнения научного исследования, план подготовки диссертации и публикаций, в которых излагаются основные научные результаты, а также перечень этапов освоения научного компонента программы аспирантуры:

Блок 1. Научная деятельность аспиранта, направленная на подготовку диссертации к защите.

I. **Ознакомительный этап** (1 курс). Формулирование темы научно-исследовательской работы и определение структуры работы. Определение целей, задач, перспектив исследования. Ознакомление с основными результатами, полученными к настоящему времени в рамках выбранной тематики исследований. Определение актуальности и научной новизны работы. Составление примерного плана исследования по выбранной тематике работы. Ознакомление с основными методами решения задач, разработанными к настоящему времени в рамках выбранной научной тематики. Получение навыков работы на специализированном оборудовании, в т. ч. с использованием специализированного программного обеспечения.

II. **Подготовительный этап** (1 курс). Теоретическая проработка и построение плана работ: выбор и обоснование метода исследования; составление плана лабораторных экспериментов; подборка необходимого экспериментального оборудования и реактивов, разработка методик синтеза соединений; выбор необходимых (аналитических, физико-химических, биологических и др.) методов исследования полученных соединений.

III. **Основной этап** (2-3 курс). Проведение запланированных исследований. Обработка результатов, обсуждение результатов, формулировка промежуточных выводов и корректировка дальнейших планов исследования на основе полученных данных.

IV. **Завершающий этап** (4 курс). Обработка, систематизация фактического и литературного материала. Формулировка заключения и выводов по результатам экспериментов и исследований. Оформление результатов работы в соответствии с требованиями к диссертации на соискание ученой степени кандидата наук (ГОСТ Р 7.0.11-2011). Подготовка научного доклада для представления результатов к защите.

Научный руководитель аспиранта вправе самостоятельно устанавливать последовательность этапов освоения научно-исследовательской деятельности в течение семестра, учебного года и всего периода обучения.

Блок 2. Подготовка публикаций, в которых излагаются основные результаты диссертации, в рецензируемых научных изданиях, подготовка заявок на патенты на изобретения, апробация работы на конференциях.

Подготовка докладов, оформление тезисов докладов, обзорных работ, научных статей или патентов по результатам научно-технического поиска, результатам теоретических и экспериментальных исследований, заявок на получение грантов (под контролем научного руководителя). Апробация работы на научных конференциях различного уровня (2-4 курс).

Блок 3. Подготовка отчетов для промежуточной аттестации.

Подготовка отчета о проделанной научно-исследовательской работе, представление отчета на лабораторном семинаре в сроки, предусмотренные календарно-учебным графиком.

6. Организация текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам научно-исследовательской работы

Текущий контроль НИР аспиранта осуществляется в форме собеседования обучающегося с научным руководителем по тематике диссертации.

Промежуточная аттестация НИР проводится каждый семестр в научных лабораториях и группах, в которых аспирантом осуществляется подготовка диссертации на соискание ученой степени кандидата наук. По итогам выполнения индивидуального плана обучающегося лаборатория проводит аттестацию на основе отчета, представленного аспирантом на заседании лабораторного семинара.

В отчет аспиранта включаются сведения о результатах научных исследований, выполненных по теме диссертации, список опубликованных и принятых к печати материалов.

Форма контроля: зачет.

Результаты оцениваются как «зачтено», «не зачтено». Оценки выставляются научным руководителем, исходя из суммы баллов, выставленных в соответствии с количественными показателями результативности НИР аспиранта.

Таблица 6.1. Минимальное количество баллов для прохождения аттестации по количественным показателям результативности НИР аспиранта

Перечень количественных показателей результативности НИР аспиранта:		1 курс	2 курс	3 курс	4 курс
Количество публикаций*	Тезисы докладов / материалы в сборниках трудов конференции	0	0	1	3**
	Статьи в рецензируемых журналах, патенты	0	0	1	2**
Готовность литературного обзора: 1 – собран литературный материал по теме; 2 – черновой вариант литературного обзора готов; 3 – литературный обзор полностью готов.		1	1	2	3
Выполнение экспериментальной работы 1 – сделана четверть работы; 2 – сделана половина работы; 3 – сделано две трети работы; 4 – эксперимент выполнен полностью.		1	2	3	4
Оформление диссертации 1 – оформлено менее половины работы; 2 – половина работы оформлена; 3 – работа полностью оформлена.		1	1	2	3
Итого:		3	4	9	15

***** Публикации считаются нарастающим итогом. Учитываются опубликованные и принятые к печати материалы.

** В случае отсутствия публикаций аспирант считается *неаттестованным.*

Завершенная диссертационная работа на соискание ученой степени кандидата наук обсуждается на лабораторном семинаре, по решению которого аспирант допускается к итоговой аттестации и выполненная диссертация на соискание ученой степени кандидата наук рекомендуется к защите.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение научно-исследовательской работы

Основная литература:

1. Основы научной работы и методология диссертационного исследования [Текст] / Г.И. Андреев, В.В. Барвиненко, В.С. Верба [и др.]. – М.: Финансы и статистика, 2012. – 295 с.
2. Райзберг, Б.А. Диссертация и ученая степень. Новые положения о защите и диссертационных советах с авторскими комментариями: (пособие для соискателей) [Текст] / Б.А. Райзберг. – М.: Инфра-М, 2012. – 252 с.

Дополнительная литература:

1. Горелов, В.П. Диссертация, ученая степень, ученое звание / В.П. Горелов, С.В. Горелов, В.Г. Сальников. – Новосибирск: Изд-во НГАВТ., 2013.п – 544 с.
2. Колесникова, Н.И. От конспекта к диссертации [Текст]: Учебное пособие по развитию навыков письменной речи для студентов, аспирантов, преподавателей / Н.И. Колесникова. – М.: Флинта; Наука, 2002. – 288 с.

Рекомендуемые к изучению нормативно-правовые документы:

1. Федеральный закон от 23 августа 1996 г. N 127-ФЗ «О науке и государственной научно-технической политике».
2. О порядке присуждения ученых степеней: Постановление Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 // Официальный интернет-портал правовой информации. http://www.pravo.gov.ru
3. ГОСТ Р 7.0.11-2011. Диссертация и автореферат диссертации. Структура и правила оформления: изд. офиц.; Федеральное агентство по техническому регулированию и метрологии. – М.: Стандартинформ, 2012. – 11 с.

Рекомендуемые источники научно-технической информации

Научно-технические журналы из библиотечного фонда ИрИХ СО РАН:

1. Вестник Российской академии наук.
2. Высокомолекулярные соединения. Серия А: Физика полимеров.
3. Высокомолекулярные соединения. Серия Б: Физика полимеров.
4. Доклады академии наук.
5. Журнал общей химии.
6. Журнал органической химии.
7. Журнал прикладной химии.
8. Журнал структурной химии.
9. Известия Академии наук. Серия химическая.
10. Успехи химии (электронный журнал).
11. Химико-фармацевтический журнал.
12. Химия в интересах устойчивого развития.
13. Химия гетероциклических соединений.
14. Электрохимия.
15. Journal of Sulfur Chemistry.
16. Mendeleev Communications.

Электронно-библиотечные системы профессиональные базы данных, информационные справочные и поисковые системы:

1. Химическая реферативная служба Американского химического общества CAS SciFinder https://sso.cas.org/
2. База данных Elsevier: Reaxys+Reaxys Medicinal Collection https://www.reaxys.com/.
3. The Cambridge Crystallographic Data Centre: база данных CSD-Enterprise https://www.ccdc.cam.ac.uk/
4. База данных медицинских и биологических публикаций PubMed https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/.
5. База данных Академия Google https://scholar.google.ru/.
6. Федеральный институт промышленной собственности http://www1.fips.ru.
7. Федеральная служба по интеллектуальной собственности http://www.rupto.ru.

8. The United States Patent and Trademark Office http://www.uspto.gov.
9. The European Patent Office http://ep.espacenet.com.
10. Academic Reference – база данных полнотекстовых англоязычных ресурсов по всем академическим дисциплинам, опубликованных в Китае https://ar.cnki.net.
11. База цитирования Elsevier B.V.: Scopus https://www.scopus.com.
12. База цитирования РИНЦ https://www.elibrary.ru/.
13. База данных электронно-библиотечной системы «Лань» https://e.lanbook.com/.
14. Ресурсы удаленного доступа и базы данных ФГБУН Государственной публичной научно-технической библиотеки СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/.
15. Электронно-библиотечная система Центральной научной библиотеки ИНЦ СО РАН (на базе АИБС «Ирбис») http://csl.isc.irk.ru/.
16. Elsevier: Science Direct Complete Freedom Collection https://www.elsevier.com/, http://www.sciencedirect.com.
17. George Thieme Verlag: коллекция журналов Thieme по химии https://www.thieme.com/.
18. Royal Society of Chemistry: база данных RSC DATABASE https://www.rsc.org/.
19. Wiley: Коллекция журналов Database Collection https://onlinelibrary.wiley.com/.
20. Справочно-правовая система "ГАРАНТ" https://internet.garant.ru/ .
21. Сайт ВАК Минобрнауки РФ https://vak.minobrnauki.gov.ru/.
22. Электронная информационно-образовательная среда ИрИХ СО РАН http://eios-irich.com.ru/moodle/.
23. Портал для аспирантов и соискателей ученой степени: http://www.аспирантура.рф/.

Бесплатные официальные открытые ресурсы Интернет:

1. Directory of Open Access Journals (DOAJ) http://doaj.org/
   Ресурс объединяет более 10000 научных журналов по различным отраслям знаний (около 2 миллионов статей) из134 стран мира.
2. Directory of Open Access Books (DOAB) https://www.doabooks.org/
   В базе размещено более 3000 книг по различным отраслям знаний, предоставленных 122 научными издательствами.
3. BioMed Central https://www.biomedcentral.com/
   База данных включает более 300 рецензируемых журналов по биомедицине, медицине и естественным наукам. Все статьи, размещенные в базе, находятся в свободном доступе.
4. Электронный ресурс arXiv https://arxiv.org/
   Крупнейшим бесплатный архив электронных научных публикаций по разделам физики, математики, информатики, механики, астрономии и биологии. Имеется подробный тематический каталог и возможность поиска статей по множеству критериев.
5. Коллекция журналов MDPI AG http://www.mdpi.com/
   Многодисциплинарный цифровой издательский ресурс, является платформой для рецензируемых научных журналов открытого доступа, издающихся MDPI AG (Базель, Швейцария). Издательство выпускает более 120 разнообразных электронных журналов, находящихся в открытом доступе.
6. Издательство с открытым доступом InTech http://www.intechopen.com/
   Первое и крупнейшее в мире издательство, публикующее книги в открытом доступе, около 2500 научных изданий. Основная тематическая направленность - физические и технические науки, технологии, медицинские науки, науки о жизни.
7. База данных химических соединений ChemSpider http://www.chemspider.com/
   ChemSpider – это бесплатная химическая база данных, предоставляющая быстрый доступ к более чем 28 миллионам структур, свойств и соответственной информации. Ресурс принадлежит Королевскому химическому обществу Великобритании (Royal Society of Chemistry).
8. Коллекция журналов PLOS ONE http://journals.plos.org/plosone/

PLOS ONE – коллекция журналов, в которых публикуются отчеты о новых исследованиях в области естественных наук и медицины. Все журналы размещены в свободном доступе (Open Access), все статьи проходят строгое научное рецензирование.

8. Материально-техническое обеспечение научно-исследовательской работы

Для освоения программы обучения и для выполнения научно-исследовательских работ по теме диссертации каждому аспиранту предоставлено индивидуальное рабочее место, оборудованное приточно-вытяжной вентиляцией, водопроводом, водоотведением, воздуховодом. Аспиранты имеют возможность использовать материально-технические средства лабораторий, в которых выполняют диссертационные работы (оргтехника, реактивы, расходные материалы, лабораторная посуда, измерительное оборудование).

Программное обеспечение:

Лицензионные продукты:

- Microsoft Office 2010 Russian Academic Open;
- Microsoft Office Professional 2010 Russian Academic Open;
- Zoom – система видеоконференцсвязи с возможностью обмена сообщениями и передачей контента в режиме реального времени.

Свободно распространяемое ПО: браузер Google Chrome67, Mozilia Firefox 60.02, Opera53; Pascal ABC 3.3; система текстовой, голосовой и видеосвязи связи Skype7.41.0.101; программа для создания электронных учебных продуктов Moodle 3.2.; программа для просмотра электронных документов Foxit PDF Reader 9.1.0.5096; архиватор 7zip 17.01 beta.

Приборная база:

Основу материально-технической базы института составляют два цифровых мультиядерных Фурье-спектрометра ЯМР (DPX 400 и AVANCE 400), рентгеновский дифрактометр Bruker D8 ADVANCE, рентгеновский дифрактометр D2 PHASER, инфракрасный Фурье-спектрометр Vertex 70 с Раман приставкой, инфракрасный Фурье-спектрометр Excalibar HE 3100 Varian, микроанализатор Flash EA 1112 CHN-O/MAS 200, микроанализатор Termo Flash EA 2000 CHNS, ЭПР-спектрометр ELEXSYS E580, установка наносекундного импульсного фотолиза, хроматомасс-спектрометр QP-5050A, хроматомасс-спектрометр Agilent 5975 с химической ионизацией, тандемный TOF/TOF масс-спектрометр Ultra Flex, электронный микроскоп TM 3000 Hitachi, спектрофлуориметр FLPS920 Edinburg Instruments, УФ/ВИД-спектрометр LAMBDA 35 и диэлькометр.

Для проведения квантово-химических расчетов имеются компьютеры в лабораториях и вычислительный кластер 39Гц/112Гб/14Тб.

Лицензионное программное обеспечение, встроенное в соответствующие приборные комплексы, являющееся его неотъемлемой частью, обеспечивающей функционирование приборов:

- Gaussian 09, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул.
- Apex 2, Apex 3, Программы для обработки данных монокристального дифрактометра;
- CCDC (ConQuest, Mercury, DASH, Mogul, Hermes), Кристаллографическая база данных и пакет программ для работы с базой данных;
- TurboMol, Пакет квантово-химических программ, для расчета геометрии и электронных характеристик молекул;
- XWinNMR, Программа для записи и обработки данных спектрометра ЯМР;
- TOPAS, EVA, Программы для обработки данных порошкового дифрактометра;
- PDF-2, База данных порошковых дифрактограм неорганических соединений;
- ResolutionsPro Opus, Пакет программ, для записи и обработки ИК-спектров;
- Lambda35, Программа для записи и обработки УФ-спектров;
- Программа Flexanalysis 3.3 для обработки массива данных по биополимерам, нелетучих биомакромолекул, олигомерам, синтетическим полимерам, солям и нелетучих веществ;

- Xepr, XSophe, XeprView, Пакет программ для записи и обработки спектров ЭПР.

  С открытой лицензией:
- Dalton2016, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций;
- DIRAC, программа для атомных и молекулярных прямых итеративных релятивистских вычислений на всех электронах, вычислений молекулярных свойств с использованием релятивистских квантово-химических методов;
- ORCA software, пакет квантово-химических программ, используемых для расчета, изучения свойств веществ, моделирования реакций.