THE COPAH

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 2023 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

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 № 5 от «04» 2023 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:

Зиять

- 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	Количество				
		промежуточной			Часов		
		аттестации	3.E.	Недель	По 3.Е.	Самостоятельная	Контроль
						работа	
1	1	Зачет	21	14	756	720	36
1	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
3	6	Зачет	36	24	1296	1260	36
4	7	Зачет	27	18	972	936	36
	8	Зачет	29	19 1/3	1044	1044	0
Сводн	ые 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.

І. 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.

<u>II. Подготовительный этап (1 курс).</u> 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.

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

<u>IV. Завершающий этап (4 курс).</u> 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

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

<u>Промежуточная аттестация</u> 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

-	количественных показателей ативности НИР аспиранта:	1 курс	курс 2 курс 3 курс		4 курс
Количество	Тезисы докладов / материалы в сборниках трудов конференции	0	0	1	3**
публикаций*	Статьи в рецензируемых журналах, патенты	0	0	1	2**
 1 – собран лите 2 – черновой ва готов; 3 – литературна 	ературного обзора: гратурный материал по теме; приант литературного обзора ый обзор полностью готов.	1	1	2	3
1 – сделана чет2 – сделана пол3 – сделано две	овина работы;	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.

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.

^{**} В случае отсутствия публикаций аспирант считается неаттестованным.

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 научнотехнической 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 научнотехнической 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/, https://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.acпирантура.pф/.

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.

<u>Свободно распространяемое ПО:</u> 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 ТМ 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.

<u>Лицензионное программное обеспечение, встроенное в соответствующие приборные комплексы,</u> 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;

- Херг, 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.

Сведения об утверждении рабочей программы научно-исследовательской работы на очередной учебный год и регистрация изменений

Учебный год	Решение Ученого совета (№ протокола, дата заседания)	Подпись ответственного (Ф.И.О., подпись)	Номер изменения (или без изменений)
2024-2025 yr.1	Apomoros 1 1º 5 on 07.05.24.	Pozenisteier O.M. Jaf	Без изменений
		2-	
одержание измен	ений (вносится от руки):		
articles			
-			