

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Научный семинар НИР.Б.1

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Маджидов Т.И.

Рецензент(ы):

Антипин И.С.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No ___ от "___" _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ___ от "___" _____ 201__г

Регистрационный No 714315

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) научный сотрудник, к.н. Маджидов Т.И. НИЛ Хемоинформатика и молекулярное моделирование Химический институт им. А.М. Бутлерова, Timur.Madzhidov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью проведения научных семинаров является подготовка студента к публичной презентации научно-исследовательской работы: выработка навыков по краткому, ясному и полному изложению материала, развитие умения отвечать на поставленные вопросы и задавать корректные вопросы. Помимо данной цели, в ходе научного семинара обсуждается научно-практическая работа студента, вырабатываются рекомендации по дальнейшему пути ее выполнения, предложения по ее совершенствованию и доработке.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " НИР.Б.1 Научно-исследовательская работа" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к базовой (общепрофессиональной) части. Осваивается на 1, 2 курсах, 1, 2, 3 семестры.

Научный семинар проводится в рамках выполнения модуля "Распределенные практики и НИР", относится к циклу НИР.Б.1.

Научный семинар тесно связан с выполнением научно-исследовательской работы студентов в рамках научно-исследовательской и преддипломной практики. На семинаре студенты презентуют общую идею работы, промежуточные результаты исследования и обсуждают работы других студентов.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	наличием представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие)
ПК-2 (профессиональные компетенции)	знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков
ПК-4 (профессиональные компетенции)	умением анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельно составлять план исследования
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-6 (профессиональные компетенции)	наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях
ПК-10 (профессиональные компетенции)	способностью определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения
ПК-11 (профессиональные компетенции)	владением основами делового общения, имеет навыки межличностных отношений и способен работать в научном коллективе
ПК-12 (профессиональные компетенции)	пониманием проблемы организации и управления деятельностью научных коллективов
ПК-7 (профессиональные компетенции)	умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовые доклады, рефераты и статьи в периодической научной печати)

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

- основы используемых им методов молекулярного моделирования, собственные научные результаты,
- мировой опыт исследований в области, поставленной руководителем в качестве темы исследования.

2. должен уметь:

- проводить презентацию собственной научной работы,
- кратко, обоснованно и ясно отвечать на поставленные вопросы,
- работать с научной литературой и системами реферирования научных данных.

3. должен владеть:

- программами создания мультимедийных презентаций.

4. должен продемонстрировать способность и готовность:

- проводить презентацию собственных научных результатов в научном коллективе,
- обоснованно, ясно и кратко отвечать на поставленные слушателями вопросы.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины отсутствует в 1 семестре; отсутствует во 2 семестре; зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.	1	10-15	0	10	0	научный доклад
2.	Тема 2. Проведение презентации промежуточных результатов по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.	2	10-15	0	10	0	научный доклад
3.	Тема 3. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме преддипломной практики. Дискуссия.	3	9-13	0	10	0	научный доклад
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			0	30	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.

практическое занятие (10 часа(ов)):

На каждом научном семинаре проводится презентация студентом подготовленного им научного доклада. После окончания презентации доклада проводится дискуссия с участием присутствующих на докладе студентов, а также приглашенных специалистов и преподавателей. Формулируются предложения студенту по улучшению качества доклада и научной работы.

Тема 2. Проведение презентации промежуточных результатов по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.

практическое занятие (10 часа(ов)):

На каждом научном семинаре проводится презентация студентом подготовленного им научного доклада. После окончания презентации доклада проводится дискуссия с участием присутствующих на докладе студентов, а также приглашенных специалистов и преподавателей. Формулируются предложения студенту по улучшению качества доклада и научной работы.

Тема 3. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме преддипломной практики. Дискуссия.

практическое занятие (10 часа(ов)):

На каждом научном семинаре проводится презентация студентом подготовленного им научного доклада. После окончания презентации доклада проводится дискуссия с участием присутствующих на докладе студентов, а также приглашенных специалистов и преподавателей. Формулируются предложения студенту по улучшению качества доклада и научной работы.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.	1	10-15		26	научный доклад
2.	Тема 2. Проведение презентации промежуточных результатов по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.	2	10-15		26	научный доклад
3.	Тема 3. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме преддипломной практики. Дискуссия.	3	9-13		26	научный доклад
	Итого				78	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Занятия проводятся в интерактивной форме:

- студент делает доклад с использованием мультимедийной техники,
- проводится дискуссия по презентованному докладу,
- студенты выступают в роли рецензентов работы.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.

научный доклад , примерные вопросы:

Примерные темы научных докладов: 1. Атом-атомное отображение в химических реакциях. Назначение, роль, основные подходы. 2. Представление химических реакций в виде матриц Уги-Дугуджи. 3. Метод минимизации реакционного пути - идеология метода и его воплощение. 4. Основные способы хранения реакций в виде плоских файлов. Структура RDF файла. 5. Генетический алгоритм стохастической оптимизации. 6. Алгоритм симулированного отжига для стохастической оптимизации. 7. Алгоритм роя частиц для стохастической оптимизации. 8. Алгоритм муравьиной колонии в стохастической оптимизации. 9. Алгоритм пчелиного роя.

Тема 2. Проведение презентации промежуточных результатов по поставленной преподавателем теме исследования в рамках научно-производственной практики. Дискуссия.

научный доклад , примерные вопросы:

Научные доклады проводятся в соответствии с темами исследования, предложенной руководителем практики. Примерные темы исследований: 1. Использование генетического алгоритма для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях. 2. Использование алгоритма муравьиной колонии для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях. 3. Использование алгоритма роя частиц для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях. 4. Использование алгоритма пчелиного роя для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях. 5. Использование алгоритма симулированного отжига для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях. 6. Использование алгоритма Монте-Карло для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях. 7. Использование алгоритма случайного поиска для поиска атом-атомного отображения в химических реакциях.

Тема 3. Проведение презентации литературного обзора по поставленной преподавателем теме преддипломной практики. Дискуссия.

научный доклад , примерные вопросы:

Научные доклады проводятся в соответствии с темой исследования, предложенной руководителем преддипломной практики. Преддипломная практика может проводиться в областях: молекулярного моделирования силовыми полями, квантовой химии, хемоинформатики. Она включает выполнение небольшой научно-исследовательской работы, которая включает: проведение анализа литературы, подготовку данных, проведение исследования, подготовка отчета.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Зачет выставляется студентам при успешной защите презентуемого материала и при активном участии в дискуссии.

7.1. Основная литература:

1. Реутов, О.А. Органическая химия В 4 ч.: Ч.: 1: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2014.- 567 с.
2. Реутов, О.А. Органическая химия]: В 4 ч.: Ч.: 2: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013.-623 с.
3. Реутов, О.А. Органическая химия В 4 ч.: Ч.: 3: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2014. -543,[1]с.
4. Реутов, О.А. Органическая химия В 4 ч.: Ч.: 4: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином,2014.-722,[4] с.

5. Маджидов Т.И. Введение в хемоинформатику: Компьютерное представление химических структур: учеб. пособие / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Казан. ун-т, 2013. - 174 с.

6. Радаева Я.Г. Word 2010: Способы и методы создания профессионально оформленных документов: Учебное пособие / Я.Г. Радаева. - М.: Форум: НИЦ ИНФРА-М, 2013. - 160 с.
<http://znanium.com/bookread.php?book=402060>

7.2. Дополнительная литература:

1. Методы компьютерного моделирования для исследования полимеров и биополимеров: [сборник]/под ред. Иванова В. А. Москва URSS [ЛИБРОКОМ, 2009. 662 с.

2. Хельтье Х.-Д., Зиппль В, Роньян Д, Фолькерс Г. Молекулярное моделирование: теория и практика. Москва Бинوم. Лаборатория знаний, 2009. 318 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

eLIBRARY.RU - <http://elibrary.ru/defaultx.asp>

Journal of Cheminformatics - http://elibrary.ru/title_about.asp?id=33312

REAXYS -

<https://www.reaxys.com/reaxys/secured/start.do;jsessionid=322CB94394725DBC629F083650086C86>

Scopus - <http://www.scopus.com/home.url>

Web of Science - <http://webofknowledge.com/?DestApp=WOS>

Поисковая система Scholar google - <http://scholar.google.ru/>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Научный семинар" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Для проведения занятий требуется аудитория с мультимедийным оборудованием.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Маджидов Т.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.