

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



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Таюрский



» 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Научный семинар по химии

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
 - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
 - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

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

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ современной химии и смежных наук при решении профессиональных задач, в том числе с использованием компьютерных технологий
ПК-4	способен объективно оценивать полученные результаты исследований и обосновывать перспективы проведенных исследований в выбранной области химии и смежных наук
УК-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий
УК-6	Способен управлять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

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

Должен уметь:

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

Должен владеть:

- программами создания мультимедийных презентаций.

Должен демонстрировать способность и готовность:

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

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.12 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к вариативной части.

Осваивается на 1, 2 курсах в 2, 3 семестрах.

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных(ые) единиц(ы) на 180 часа(ов).

Контактная работа - 21 часа(ов), в том числе лекции - 0 часа(ов), практические занятия - 20 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 1 часа(ов).

Самостоятельная работа - 159 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

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

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Научное исследование и его этапы.	2	0	2	0	10
2.	Тема 2. Выбор направления научно-исследовательской работы. Планирование научно-исследовательской работы.	2	0	2	0	10
3.	Тема 3. Общие требования к научно-исследовательской работе.	2	0	2	0	10
4.	Тема 4. Научная информация: поиск, накопление, обработка. Литературный обзор как обязательная часть научного исследования.	2	0	4	0	32
5.	Тема 5. Представление результатов научной работы: отчет.	3	0	5	0	50
6.	Тема 6. Представление результатов научной работы: презентация и доклад.	3	0	5	0	47
	Итого		0	20	0	159

4.2 Содержание дисциплины (модуля)**Тема 1. Научное исследование и его этапы.**

Основные подходы к определению понятий "наука", "научное знание". Отличительные признаки науки. Наука как система. Процесс развития науки. Цель и задачи науки. Субъект и объект науки. Классификация наук. Характерные особенности современной науки. Определение научного исследования. Цели и задачи научных исследований, их

классификация по различным основаниям. Формы и методы научного исследования. Теоретический уровень исследования и его основные элементы. Эмпирический уровень исследования и его особенности.

Тема 2. Выбор направления научно-исследовательской работы. Планирование научно-исследовательской работы.

Формулирование темы научного исследования. Критерии, предъявляемые к теме научного исследования. Постановка проблемы исследования, ее этапы. Определение цели и задач исследования. Этапы научно-исследовательской работы. Правильная организация научно-исследовательской работы. Планирование научного исследования. Рабочая программа и ее структура. Субъект и объект научного исследования. Интерпретация основных понятий. План и его виды. Анализ теоретико-экспериментальных исследований. Формулирование выводов.

Тема 3. Общие требования к научно-исследовательской работе.

Основные требования, предъявляемые к научному исследованию. Структура научно-исследовательской работы. Способы написания текста. Язык и стиль научной речи. Оформление таблиц, графиков, формул, ссылок. Оформление отчета по НИР по ГОСТ 7.32-2017. "Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Отчет о научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления."

Тема 4. Научная информация: поиск, накопление, обработка. Литературный обзор как обязательная часть научного исследования.

Определение понятий "информация" и "научная информация". Свойства информации.

Основные требования, предъявляемые к научной информации. Источники научной информации и их классификация по различным основаниям. Информационные потоки. Работа с источниками информации. Роль литературного обзора в научном исследовании.

Тема 5. Представление результатов научной работы: отчет.

Три основных раздела отчета по результатам научной работы:

- введение в проблему исследования (литературный обзор) с постановкой целей и задач, разработкой программы исследования,
- описание и анализ собственных результатов,

-обсуждение результатов в соответствии с исходными целями и задачами.

Основные критерии работы, на которые обращено особое внимание при защите научной работы (научная новизна работы, оформление работы, трудоемкость, гармоничность).

Сравнение отчета как формы представления результатов научной работы с такими формами, как статья, магистерская диссертация, кандидатская диссертация.

Тема 6. Представление результатов научной работы: презентация и доклад.

Подготовка презентации и доклада по результатам научного исследования: требования и рекомендации.

Причины плохого доклада. Особенности устной презентации. Структура доклада. Общие правила составления презентаций. Особенности оформления химической информации: дополнительные требования. Основные ошибки при подготовке презентации и доклада.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996ин/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС 3++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

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/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид работ	Методические рекомендации
практические занятия	Первая часть практических занятий проходит в форме разбора темы и ее обсуждения. Обучающийся должен приходить на занятие подготовленным, имея при себе краткий конспект по теме практического занятия. Вторая часть практических занятий проходит в форме заслушивания и обсуждения научных докладов по темам, предложенным преподавателем. В соответствии с темой практического занятия внимания заостряется на тех или иных аспектах оформления результатов научного исследования: подготовке отчета, презентации, доклада.
самостоятельная работа	Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает: - чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины; - подготовку к практическим занятиям; - работу с Интернет-источниками; - подготовку к защите научного доклада, сдаче зачета. Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в рабочей программе дисциплины, следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.
зачет	Подготовка к зачету способствует закреплению, углублению и обобщению знаний, получаемых, в процессе обучения, а также применению их к решению практических задач. Готовясь к зачету, студент ликвидирует имеющиеся пробелы в знаниях, углубляет, систематизирует и упорядочивает свои знания. На зачете студент демонстрирует то, что он приобрел в процессе обучения по конкретной учебной дисциплине. При подготовке к зачету необходимо ознакомиться списком вопросов к зачету, повторно ознакомиться с лекционным материалом, систематизировать информацию по курсу. Особое внимание следует уделить разделам курса, изученным самостоятельно и вызывавшим наибольшее затруднение при теоретическом изучении и решении практических задач.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

Компьютерный класс.

12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счёт альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;
- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи:
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачёте или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе "Хемоинформатика и молекулярное моделирование".

Приложение 2
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.12 Научный семинар по химии

Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Основная литература:

1. Маджидов Т.И. Введение в хемоинформатику: Ч.1 Компьютерное представление химических структур: учебное пособие / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, И.С. Антипин, А.А. Варнек. - Казань: Казанский университет, 2013. - 174 с.
2. Введение в хемоинформатику: учебное пособие. Ч. 2. Химические базы данных / Т.И. Маджидов, И.И. Баскин, А.А. Варнек. - Казань: Издательство Казанского университета, 2015. - 188 с.
3. Введение в хемоинформатику: учебное пособие. Ч. 3. Моделирование 'структура-свойство' / И.И. Баскин, Т.И. Маджидов, А.А. Варнек. - Казань: Издательство Казанского университета, 2015. - 304 с.
4. Набатов, В. В. Методы научных исследований : введение в научный метод : учебное пособие / В. В. Набатов. - Москва : МИСИС, 2016. - 84 с. - ISBN 978-5-906846-13-6. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/93679> (дата обращения: 10.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
5. Основы научных исследований : учебное пособие / Б.И. Герасимов, В.В. Дробышева, Н.В. Злобина [и др.]. - 2-е изд., доп. - Москва : ФОРУМ : ИНФРА-М, 2018. - 271 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). - ISBN 978-5-16-103085-1. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/924694> (дата обращения: 10.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

Дополнительная литература:

1. Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем : учебное пособие / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров. - Санкт-Петербург : Лань, 2010. - 384 с. - ISBN 978-5-8114-1032-3. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/156> (дата обращения: 10.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Каплан, И. Г. Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы : учебное пособие / И. Г. Каплан ; под редакцией Н. Ф. Степанова ; перевод с английского Д. С. Безрукова, И. Г. Рябинкина. - 3-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2017. - 397 с. - ISBN 978-5-00101-503-1. - Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com/book/94111> (дата обращения: 10.03.2020). - Режим доступа: для авториз. пользователей.
3. Аминова, Р. М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ : учебное пособие / Р. М. Аминова. - Казань : Казанский государственный университет, 2009. - 124 с.
4. Резник, С. Д. Аспирант вуза: технологии научного творчества и педагогической деятельности : учебник / С.Д. Резник. - 7-е изд., изм. и доп. - Москва : ИНФРА-М, 2019. - 400 с. - (Менеджмент в науке). - www.dx.doi.org/10.12737/textbook_5b3357d54cc605.24561409. - ISBN 978-5-16-106249-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/944379> (дата обращения: 10.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

Приложение 3
к рабочей программе дисциплины (модуля)
Б1.В.12 Научный семинар по химии

Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2020

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, учебно-методические комплексы, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.