

ПРИНЯТО
решением ученого совета
химико-технологического
факультета ТвГУ
Протокол № 2
от « 22» сентября 2021 г.

ПОЛОЖЕНИЕ
об организации и проведении
Конкурса научно-исследовательских работ,
посвященного двадцатилетию образования
химико-технологического факультета

СОДЕРЖАНИЕ

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ	3
2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ И СТАТУС НАУЧНОГО МЕРОПРИЯТИЯ.....	4
3. ПОРЯДОК ОРГАНИЗАЦИИ МЕРОПРИЯТИЯ	5
4. ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ ОРГАНИЗАЦИИ И ПРОВЕДЕНИЯ НАУЧНОГО МЕРОПРИЯТИЯ.....	6
5. ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ЗАЯВКА УЧАСТНИКА	10
6. ПРИЛОЖЕНИЕ 2. ПРИМЕР ОФОРМЛЕНИЯ	11

1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

1.1. Настоящее Положение об организации и проведении **Конкурса научно-исследовательских работ, посвященного двадцатилетию образования химико-технологического факультета**, определяет порядок планирования, подготовки и проведения научных мероприятия и форму отчетности по результатам его работы.

1.2. Основными целями проведения **Конкурса научно-исследовательских работ, посвященного двадцатилетию образования химико-технологического факультета** является развитие и реализация научного потенциала университета, создание среды профессионального общения с целью обсуждения наиболее актуальных научных проблем, обмена научными достижениями, представление результатов научно-исследовательской деятельности химико-технологического факультета по основным направлениям исследований, развитие творческих связей с академическими структурами, предприятиями и организациями предпринимательского сектора.

1.3. Задачи научного мероприятия:

- активизация научно-исследовательской деятельности структурных подразделений университета;
- обмен опытом научного поиска между исследователями и установление сотрудничества между ними;
- обеспечение интеграции образовательного процесса и научно-исследовательской деятельности;
- совершенствование подготовки научных кадров;
- привлечение обучающихся к научному поиску и апробация результатов научных исследований молодых ученых.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ И СТАТУС НАУЧНОГО МЕРОПРИЯТИЯ

2.1. Конкурс - научное мероприятие – это одна из форм организации научной деятельности в виде собрания групп исследователей (из числа профессорско-преподавательского состава, научных сотрудников, студентов, аспирантов, представителей других сфер деятельности и т.д.) для обсуждения определенных вопросов развития химии, результатов проводимых исследований, анализа опыта деятельности.

2.2. Конкурс научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета, носит научно-теоретический, научно-практический, научно-методический характер и проводится в области химии.

2.3. Конкурс научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета, определяется как мероприятие локального уровня.

2.4. К участию в **Конкурсе научно-исследовательских работ, посвященном двадцатилетию образования химико-технологического факультета**, приглашаются обучающиеся химико-технологического факультета и общеобразовательных учреждений Твери и Тверской области. Участие в Конкурсе научно-исследовательских работ, посвященном двадцатилетию образования химико-технологического факультета, предусмотрено в двух форматах. На первом этапе подача материалов участниками происходит в заочной форме, участие во втором этапе носит дистанционный характер (дистанционное выступление с докладом).

2.5. Прием материалов на **Конкурс научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета**, будет осуществляться по основным направлениям:

- биохимия и биотехнологии
- неорганическая и аналитическая химия
- органическая химия
- физическая химия

3. ПОРЯДОК ОРГАНИЗАЦИИ МЕРОПРИЯТИЯ

Общее руководство **Конкурсом научно-исследовательских работ, посвященным двадцатилетию образования химико-технологического факультета**, возлагается на организационный комитет 3.1. На организационный комитет возлагается подготовка и проведение **Конкурса научно-исследовательских работ, посвященного двадцатилетию образования химико-технологического факультета**:

- определение основных мероприятий по подготовке и проведению Конкурса НИР;
- составление программы Конкурса НИР;
- работа с участниками и гостями мероприятия, и их материалами до начала Конкурса, во время проведения конкурсных работ и по их завершению;
- оформление и электронная рассылка сборника материалов Конкурса НИР, сертификатов участников и дипломов победителей;
- решение текущих и возникающих организационных вопросов.

В целях улучшения работы Конкурса НИР оргкомитет на основании приказа ректора может принять решение об изменении своего состава. Для проведения различных мероприятий по подготовке и обеспечению работы научного мероприятия оргкомитет может организовать рабочие группы, в состав которых могут входить члены педагогического коллектива участвующих в Конкурсе НИР кафедр химико-технологического факультета и общеобразовательных учреждений. Руководителем рабочей группы оргкомитет назначает одного из своих членов.

3.2. Оргкомитет **Конкурса научно-исследовательских работ, посвященного двадцатилетию образования химико-технологического факультета**, формирует компетентное жюри, которое выбирает победителей

4. ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ ОРГАНИЗАЦИИ И ПРОВЕДЕНИЯ НАУЧНОГО МЕРОПРИЯТИЯ

4.1 На Конкурс научно-исследовательских работ, посвященный двадцатилетию образования химико-технологического факультета, принимаются научно-исследовательские проекты в области биохимии и биотехнологий, неорганической и аналитической химии, органической и физической химии обучающихся общеобразовательных учреждений и химико-технологического факультета присланные на адрес: Rusakova.NP@tversu.ru до 27 ноября 2021 г.

4.1.1 Присланные работы участвуют в конкурсе в двух номинациях:

1. «Апробированное научное исследование»
2. «Юные таланты»

Номинация «Апробированное научное исследование» объединяет исследовательские проекты обучающихся химико-технологического факультета, материал которых проходил частичную апробацию ранее. Первый этап Конкурса работы студентов проходят в рамках кафедры, соответствующей заявленной научной области представленного материала. Рабочая группа, состоящая из четырех членов педагогического коллектива кафедры, с 29 ноября по 5 декабря 2021г отбирает во второй тур Конкурса материал в количестве пяти работ, наиболее полно отвечающий всем предъявляемым требованиям и представляющий наибольшую практическую значимость. Второй тур Конкурса НИР проводится для 20 претендентов 6 декабря 2021 г. дистанционно, с использованием платформы Teams. Конкурсанты представляют свой материал в виде презентации, выполненной в PowerPoint на 5-6 слайдах, с докладом не более 6 минут. Жюри выбирает четыре лучшие работы в номинации, оценивая представленные исследования по критериям: научная новизна работы, актуальность и значимость исследования, владение материалом и доступность изложения, наличие и количество апробации по теме исследования, соответствие требованиям оформления.

Номинация «Юные таланты» объединяет материалы обучающихся общеобразовательных учреждений и студентов начальных курсов химико-технологического факультета (без апробации). Первый этап Конкурса работы участников проходят дистанционно, с использованием платформы Teams в рамках которой рабочая группа, состоящая из представителей педагогического коллектива общеобразовательных учреждений, **с 29 ноября по 5 декабря 2021г** отбирает материал во второй тур Конкурса. Второй тур номинации проводится 6 декабря 2021 г. дистанционно, с использованием платформы Teams. Конкурсанты представляют свой материал в виде презентации, выполненной в PowerPoint на 5 слайдах, с докладом не более 5 минут. Эксперты выбирают четыре лучшие работы в номинации, оценивая представленные исследования по критериям: научная новизна работы, актуальность и значимость исследования, владение материалом и доступность изложения, соответствие требованиям оформления.

4.1.2. Для участия в **Конкурсе научно-исследовательских работ, посвященном двадцатилетию образования химико-технологического факультета**, необходимо **до 27 ноября 2021 г.** на адрес Rusakova.NP@tversu.ru отправить :

1. Заявку на участие в Конкурсе НИР (см. Приложение 1).
2. Электронный вариант материалов, оформленный по указанным ниже требованиям (см. Приложение 2).

Место проведения Конкурса научно-исследовательских работ, посвященного двадцатилетию образования химико-технологического факультета: 170002 г. Тверь, Садовый пер., 35.

Научные работы (статьи) участников Конкурса НИР публикуются в электронном сборнике научных трудов. Верстка сборника научных трудов происходит **с 29 ноября по 5 декабря 2021г.**

Требования к оформлению материалов Конкурса НИР, участвующих в первом туре:

- Объем материалов: 2 страницы формата А4 в текстовом редакторе WORD.
- Формат текста: Word for Windows. Поля: 2 см – со всех сторон; Шрифт: размер (кегель) – 14; тип – Times New Roman, интервал 1,5.
- Первой строкой без абзацного отступа полужирным стилем печатается название материалов, выравнивание по центру
- Второй строкой строчными буквами фамилия и инициалы имени отчества (в скобках указывается тип обучения, год, курс или класс), выравнивание справа.
- Третья строка: Научный руководитель: должность, научная степень, фамилия, инициалы имени отчества. Выравнивание справа
- Пустая строка.
- Текст материалов научного исследования, абзацный отступ – 1,25 см, выравнивание по ширине.
- Допустимо включение в текст рисунков, графиков, химических формул, схем. Подписи к рисункам, графикам, схемам, названия таблиц, их содержимое оформляются шрифтом Times New Roman, 12.
- Для включения в номинацию «Апробированное научное исследование» обязательно наличие ссылок в тексте и списка с апробацией работ.
- Список литературы по мере упоминания источника виде пронумерованного списка (12 шрифт). Отображение ссылок в виде сносок внизу страницы не допускается! *Оформление сносок:* в тексте указание на источник оформляется в квадратные скобки, название источника вносится в список литературы (пример: [1]).

Присылаемые тексты должны быть тщательно отредактированы. Если оформление материалов или их содержание не соответствует настоящим правилам, тезисы могут быть возвращены автору или отправлены на доработку.

Второй тур Конкурса НИР проходит в виде устных докладов. Доклады должны сопровождаться презентацией, выполненной в PowerPoint. Количество слайдов – не более 6, слайды пронумерованы, озаглавлены, кегль шрифта не менее 24, анимацию слайдов по возможности не использовать, время выступления – не более 5-6 мин. На последнем слайде отражена апробация работы и/или выводы, сделанные по результатам НИР.

Подведение итогов Конкурса НИР осуществляется в день работы второго тура – 6 декабря. В течение недели всем участникам отправляются на электронный адрес сертификаты (сканированный документ), победители в номинациях награждаются дипломами.

4.1.3. Информацию о предстоящем **Конкурсе научно-исследовательских работ, посвященном двадцатилетию образования химико-технологического факультета** можно найти на официальном сайте химико-технологического факультета разделе «Наука» (<https://chemistry.tversu.ru/events/106>) и «Новости». По вопросам проведения конференции можно обращаться на электронный адрес: Rusakova.NP@tversu.ru (Русакова Н.П.).

**Заявка на участие в
Конкурсе научно-исследовательских работ, посвященном
двадцатилетию образования химико-технологического факультета**

Фамилия	
Имя	
Отчество	
Полное название организации/учреждения	
Индекс, адрес	
Телефон	
Направление, год обучения (класс)	
ФИО научного руководителя (полностью)	
E-mail	
Название доклада	
Направление работы	
Номинация	
Согласие на обработку персональных данных (Да, личная подпись автора)	

Сравнение групповых характеристик распределения электронной плотности 2,2-диметилгептана и триметилпентилсульфида

Иванов И.И. (специалист, 5 курс)

Научный руководитель: доцент, к.х.н. Петров П.П.

Сульфиды занимают важнейшее место в жизни человека. Их использование в производстве лекарственных препаратов и недостаточная изученность свойств распределения электронной плотности делают эти соединения значимыми объектами исследования методами квантовой химии.

Оптимизация геометрии 2,2-диметилгептана ((CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃) и триметилпентилсульфида ((CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃) проведена методом B3LYP/6-311++G(3df,3pd) в программе GAUSSIAN 03 [1]. Вычисление зарядов (q) и объемов (V) «топологических» атомов – в программе AIMALL [2]. Групповые характеристики ($q(R)$, $V(R)$) суммированы из атомных q , V в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» [3] и сведены в таблицу.

Ранее автором были опубликованы данные для гомологического ряда триметилсульфидов в работе [4]. Показано влияние атома серы на заряды и объемы групп четырех соседних метиленов, отмечена неоднородность распределения электронной плотности ($\rho(r)$) на ближайших метильных фрагментах. Распределение $\rho(r)$ на функциональных группах гомологического ряда триметилалкилов представлено в материалах [5]. Однако сравнения групповых интегральных характеристик $\rho(r)$ между представителями гомологических рядов в рамках используемых методов до сих пор не проводилось.

Сравнение зарядов $q(R)$ и объемов $V(R)$ групп CH₃ в (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ показало смещение электронной плотности с CH₃, находящейся в плоскости алкильной цепи в сторону двух CH₃, расположенных перпендикулярно ей. Это не соответствует равномерному распределению $\rho(r)$ в (CH₃)₃-C-(CH₂)₄-CH₃ (табл.). В (CH₃)₃-S-(CH₂)₄-CH₃ группа CH₃ фрагмента (CH₂)₄-CH₃ проявляет

меньшую электроотрицательность по сравнению с аналогичной группой в $(\text{CH}_3)_3\text{C}-(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$. На изменение $V(\text{CH}_3)$ и параметров ближайшей к нему CH_2 $V(\text{CH}_2)$ и $q(\text{CH}_2)$ в $(\text{CH}_3)_3\text{S}-(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$ оказывает влияние стерическое воздействие фрагмента $(\text{CH}_3)_3\text{S}$.

Таблица: Заряды и объемы групп молекул $(\text{CH}_3)_3\text{R}-(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$, где R = C, S.

	CH_3^{*1}	CH_3^{*2}	R	CH_2	CH_2	CH_2	CH_2	CH_3
R	Заряды групп $q(R)$ в а.е.							
S	0,049	-0,302	0,471	0,007	0,050	0,010	0,024	-0,008
C	-0,030	-0,030	0,105	-0,014	0,000	0,001	0,015	-0,015
R	Объемы групп $V(R)$ в Å^3							
S	30,99	35,35	18,13	21,95	22,69	23,45	23,59	33,04
C	32,07	32,07	6,15	22,86	22,80	23,47	23,66	33,14

CH_3^{*1} метильный фрагмент в плоскости алкильной цепи.

CH_3^{*2} метильные заместители с идентичным распределением электронной плотности у второго атома С в плоскости, перпендикулярной плоскости алкильной цепи.

Полученные результаты квантово-химического исследования показывают, что смещение электронной плотности в сторону CH_3 с S гораздо больше, чем с C, как и стерическое влияние серосодержащего триметильного фрагмента на пентильную цепь по сравнению с изопропильным. Данное наблюдение остается справедливым и при увеличении алкильного фрагмента с пяти до десяти углеродных атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Pople et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1, SMP). Gaussian Inc. Pittsburgh PA. 2007.
2. Todd A. Keith. AIMAll (Version 11.09.18, Professional). 2011. (<http://aim.tkgristmill.com>.)
3. Бейдер Р., Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001, 528 с.

СПИСОК АПРОБАЦИИ:

4. Иванов И.И., Петров П.П. Изменение групповых зарядов метиленов алкильной цепи в гомологическом ряду триметилсульфидов // Вестник ТвГУ: Сер. Химия. 2020. № 4. С76-89.
5. Иванов И.И., Петров П.П. Анализ электронной плотности разветвленных алканов // XX Каргинские чтения. Сборник материалов. 2019. С 61.

**Лицензионный договор о предоставлении
права использования произведения**

г. Тверь

« ____ » _____ 20__ г.