

ПРИНЯТО

решением ученого совета
химико-технологического
факультета ТвГУ
Протокол №6
от «5» февраля 2020 г.

УТВЕРЖДАЮ



И.о. ректора


Л.Н. Скаковская

ПОЛОЖЕНИЕ

**об организации и проведении ежегодной
Всероссийской научно-технической конференции
молодых ученых «Физика, химия и новые
технологии» - Каргинские чтения**

ПОЛОЖЕНИЕ

о ежегодной Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» - Каргинские чтения

1. Настоящее положение определяет статус, цели и задачи, порядок проведения Каргинских чтений.

1.1. Всероссийская научно-техническая конференция молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» проводится в очной и заочной форме.

1.2. Цель:

Целью проведения Каргинских чтений является развитие и реализация научного потенциала ТвГУ, а также утверждение ведущей роли университета в интеграции науки, образования и промышленности Тверского региона

Задачи:

- Привлечение студентов к научному поиску и апробация результатов научных исследований молодых ученых
- Обмен опытом научного поиска между исследователями и установление сотрудничества между ними
- Совершенствование подготовки научных и научно-педагогических кадров;

2. Участники Каргинских чтений

К участию в работе конференции приглашаются школьники, студенты, аспиранты, сотрудники учебных заведений и предприятий Твери, Тверской области и других регионов России в возрасте до 28 лет.

3. Направления работы Каргинских чтений

В рамках Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» предполагается проведение устной и стендовой сессий по следующим направлениям:

- агрохимия
- аналитическая химия и новые методы исследования
- биохимия и биофизика
- компьютерная физика и химия
- неорганическая химия
- новые технологии (био-, нано-, гель- и др.) и новые материалы
- органическая химия
- физика твердого тела
- физика и химия высокомолекулярных соединений
- химическая технология
- физическая химия
- экологическая химия

4. Руководство Каргинских чтений

Общее руководство конференции назначается приказом ректора по университету.

4.1. На руководителей возлагается подготовка и проведение Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии»:

- составление программы конференции;
- работа с участниками мероприятия и их материалами до конференции, во время Каргинских чтений и по их завершению;
- оформление и вручение сертификатов участников и дипломов победителей;
- определение основных мероприятий по ее подготовке и проведению;
- решение текущих и возникающих организационных вопросов.

В целях улучшения работы Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» оргкомитет 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 работе конференции вузов. Руководителем рабочей группы оргкомитет назначает одного из своих членов.

4.2. Оргкомитет Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» представляет компетентное жюри, которое выбирает победителей в устной и стендовой сессии в номинациях «Физика», «Химия» и «Новые технологии» на конкурсной основе. Утвержденное по предложению Тверского Регионального Представительства Экспертное Жюри проведет отбор лучших научных работ в полуфинальный тур конкурса «УМНИК»

5. Порядок работы Каргинских чтений

Для участия во Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» автору необходимо направить за один месяц до начала работы конференции в электронном виде на адрес kargin_readings@tversu.ru следующие документы в отдельных файлах:

1. Заявку на участие в Каргинских чтениях (см. Приложение 2).
2. Электронный вариант статьи, оформленный по указанным ниже требованиям (см. Приложение 1).

Место проведения Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии»: 170100 г. Тверь, ул Желябова, д. 33.

Время проведения два дня на последней декаде марта.

Научные работы (статьи) участников Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» публикуются в сборнике научных трудов, который включен в **Российский индекс научного цитирования (РИНЦ)** и размещен в **Научной электронной библиотеке (eLibrary.ru)**. Издание сборника научных трудов происходит с присвоением международного индекса ISBN, УДК, ББК и рассылается во все ведущие библиотеки России в течение месяца после окончания мероприятия.

Требования к оформлению статьи:

- Объем материалов: до 1 страницы формата А4 в текстовом редакторе WORD.
- Формат текста: Word for Windows.
- Поля: 2,5 см – со всех сторон; Шрифт: размер (кегель) – 14; тип – Times New Roman.
- Верхней строкой без абзацного отступа печатается УДК материалов, выравнивание слева
- Внизу через пробел строчными буквами фамилия и имя автора полностью, выравнивание по центру.
- Следующая строка содержит название (печатается заглавными буквами (кегель) – 14, шрифт – жирный, выравнивание по центру, без абзацного отступа).
- Пустая строка
- На следующей строке – инициалы и фамилия руководителя (лей), выравнивание справа, без абзацного отступа
- Выравнивание по центру, без абзацного отступа: полное название организации, город.
- Выравнивание по центру, без абзацного отступа: кафедра, школа или другое место учебы (работы) автора
- После отступа в 1 интервал следует **текст тезисов, печатаемый через одинарный интервал (14 шрифт)**, абзацный отступ – 1,25 см, выравнивание по ширине.
- Допустимо включение в текст рисунков, графиков, химических формул, схем и списка литературы. Подписи к рисункам, графикам, схемам, названия таблиц, их содержимое, а также список литературы оформляются шрифтом Times New Roman, 12.
- 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 тезисов не соответствует настоящим правилам, материалы могут быть возвращены автору.

Программа ежегодной Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии», количество предметных секций, содержание и виды творческих конкурсов определяются и утверждаются оргкомитетом не позднее, чем за неделю до ее начала.

3. Подведение итогов Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии» осуществляется по окончании каждой сессии. Всем участникам вручаются сертификаты, победители по трем направлениям: физика, химия и новые технологии награждаются дипломами. Утвержденное по предложению Тверского Регионального Представительства Экспертное Жюри проведет отбор лучших научных работ из премированных дипломами в полуфинальный тур ежегодного конкурса «УМНИК» (для этого авторы рекомендованных работ из числа победителей должны будут зарегистрировать свою заявку на участие в программе «УМНИК»).

7. Контактная информация

Информацию о конференции можно найти на официальном сайте Тверского государственного университета: <http://university.tversu.ru>. По вопросам проведения конференции можно обращаться на электронный адрес: kargin_readings@tversu.ru (Русакова Н.П.) или по тел. 58-05-22 доб. 121 (Андрианова Я.В.).

СРАВНЕНИЕ ГРУППОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ 2,2-ДИМЕТИЛГЕПТАНА И ТРИМЕТИЛПЕНТИЛСУЛЬФИДА

Руководители: В.В. Васильев, П.П. Петров
Тверской государственный университет, г. Тверь
Кафедра физической химии

Оптимизация геометрии 2,2-диметилгептана $((\text{CH}_3)_3\text{-C-(CH}_2)_4\text{-CH}_3)$ и триметилпентилсульфида $((\text{CH}_3)_3\text{-S-(CH}_2)_4\text{-CH}_3)$ была проведена методом V3LYP/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.

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

CH₃^{*1} метильный фрагмент в плоскости алкильной цепи.

CH₃^{*2} метильные заместители с идентичным распределением электронной плотности у второго атома С в плоскости, перпендикулярной плоскости алкильной цепи.

Сравнение зарядов $q(R)$ и объемов $V(R)$ групп CH₃ в $(\text{CH}_3)_3\text{-S-(CH}_2)_4\text{-CH}_3$ показало смещение электронной плотности ($\rho(r)$) с CH₃, находящейся в плоскости алкильной цепи в сторону двух CH₃, расположенных перпендикулярно ей. Это не соответствует равномерному распределению $\rho(r)$ в $(\text{CH}_3)_3\text{-C-(CH}_2)_4\text{-CH}_3$ (табл.). В $(\text{CH}_3)_3\text{-S-(CH}_2)_4\text{-CH}_3$ группа CH₃ фрагмента $(\text{CH}_2)_4\text{-CH}_3$ проявляет меньшую электроотрицательность по сравнению с аналогичной группой в $(\text{CH}_3)_3\text{-C-(CH}_2)_4\text{-CH}_3$. На изменение $V(\text{CH}_3)$ и параметров ближайшей к нему CH₂ $V(\text{CH}_2)$ и $q(\text{CH}_2)$ в $(\text{CH}_3)_3\text{-S-(CH}_2)_4\text{-CH}_3$ оказывает влияние стерическое воздействие фрагмента $(\text{CH}_3)_3\text{-S}$.

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.

Приложение 2.

**Заявка на участие во
Всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и
новые технологии»**

Фамилия	
Имя	
Отчество	
Полное название организации или учреждения	
Почтовый индекс и адрес	
Телефон	
Должность	
Ученая степень	
Звание	
E-mail	
Название доклада	
Секция / направление работы _____	
<p>Форма участия (отметить): Участие с тезисами доклада/ заочное участие с тезисами доклада/ очное участие с публикацией /</p>	
Необходимое оборудование: Аудио/Видео/ОНР проектор/Мультимедиа проектор и др	
Согласие на обработку персональных данных (Да, личная подпись автора)	
Заказ сертификата (да/нет)	