



## XXVIII Каргинские чтения

Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии»,



Тверской государственный университет

Тверской государственный университет, Тверской государственный технический университет, Тверской государственный медицинский университет и Тверская сельскохозяйственная академия организуют в рамках XXVIII Каргинских чтений всероссийскую научно-техническую конференцию молодых учёных «Физика, химия и новые технологии».

### Оргкомитет конференции:

Пахомов П.М. – председатель  
Акимов А.А.  
Алексеев В.Г.  
Андрианова Я.В.  
Барabanова Е.В.  
Баранова Н.В.  
Большакова Н.Н.  
Быков А.В.  
Вишневецкий Д.В.  
Ворончихина Л.И.  
Виноградова М.Г.  
Долуда В.Ю.  
Дроздов И.А.  
Журавлев О.Е.

Зубарева Г.М.  
Иванова А.И.  
Каплунов И.А.  
Комаров П.В.  
Косивцов Ю.Ю.  
Лагушева Е.И.  
Матвеева В.Г.  
Межеумов И.Н.  
Мейсурова А.Ф.  
Молчанов В.П.  
Никольский В.М.  
Орлов Ю.Д.  
Пастушенков Ю.Г.  
Педько Б.Б.

Русакова Н.П. – зам. председателя  
Самсонов В.М.  
Семенова Е.М.  
Смирнова Т.И.  
Солнышкин А.В.  
Степачева А.А.  
Сильман М.Г.  
Туровцев В.В.  
Усанова З.И.  
Феофанова М.А.  
Хижняк С.Д.  
Шилова О.В.

Конференция проводится **31 марта - 1 апреля 2021 года в 10 часов в очно-заочной форме, в дистанционном формате**. Подключение участников будет осуществляться по ссылке, опубликованной на официальном сайте мероприятия.

Научная программа конференции предусматривает проведение **устной (31 марта) и стендовой (1 апреля) сессий** по направлениям:

- химия
- физика
- новые технологии

К участию в работе конференции приглашаются школьники, студенты, аспиранты, сотрудники учебных заведений и предприятий Твери, Тверской области и других регионов России. Язык конференции – русский. Возраст участников конференции – **до 30 лет**. По результатам мероприятия будет выпущен сборник материалов, с присвоением ISBN и размещением в базе данных РИНЦ. Сборники предыдущих конференций можно посмотреть на сайте [Каргинские чтения \(tversu.ru\)](http://Каргинские_чтения_(tversu.ru)) или на страничке ТвГУ [Химико-технологического факультета](http://Химико-технологического_факультета).



Организационный взнос за участие не взимается.

Тезисы докладов и заявку участника необходимо прислать не позднее **8 марта 2022 года** по адресу: 170002, Тверь, Садовый переулок, 35. ТвГУ, кафедра физической химии, Пахомову П.М., Русаковой Н.П. или на электронный адрес конференции: [kargin\\_readings@tversu.ru](mailto:kargin_readings@tversu.ru)

Информация о конференции, образец оформления материалов и заявки участника, положение о мероприятии и приказ о конференции размещены на официальном сайте Каргинских чтений Тверского государственного университета: <https://kargin.tversu.ru>. По вопросам проведения конференции можно обращаться на электронный адрес: [kargin\\_readings@tversu.ru](mailto:kargin_readings@tversu.ru) или по тел. 58-05-22 доб. 121 (Русакова Наталья, Андрианова Яна).

\* \* \* \*

Требования к оформлению тезисов доклада:

К публикации принимаются тезисы объемом **не более 1 полной страницы формата А4**, шрифт Times New Roman, кегль 14, одинарный интервал, поля – 2,5 см со всех сторон. В тезисах указывается УДК, ФИО автора полностью, использование соавторов не допускается, научный руководитель (не более двух). Допустимо включение в текст рисунков, графиков, химических формул, схем и списка литературы. Подписи к рисункам, графикам, схемам, названия таблиц и их содержимое оформляется шрифтом Times New Roman, 12. Материалы, оформленные не в соответствии с требованиями, рассматриваться не будут. Пример оформления представлен ниже.

Предварительная программа конференции и точное расписание сессий будут высланы на электронные адреса участников после 15 марта 2022 г.

Представленные на конференцию устные 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 мин.

Работы, заявленные для участия в стендовой сессии - стендовые доклады - должны быть выполнены в PowerPoint – 1 страница или pdf. Экспертное жюри заслушает представление каждого стенда в течении 3 минут.

Материалы, представленные для заочного участия, так же сопровождаются стендом в PowerPoint – 1 страница или pdf, конкурс среди стендов проходит без авторских комментариев.

\* \* \* \*



Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии» входит в перечень мероприятий, на которых проводится отбор для участия в программе «УМНИК – 2022» в Тверском регионе (с программой «УМНИК» можно ознакомиться на сайте:

<http://www.fasie.ru/index.php?rid=120>).

Утвержденное по предложению Тверского Регионального Представительства Экспертное Жюри проведет отбор лучших научных работ в полуфинальный тур конкурса «УМНИК – 2022» (для этого авторы рекомендованных работ из числа победителей должны будут зарегистрировать свою заявку на участие в программе «УМНИК – 2022» в апреле 2022 г.). Авторам докладов, принявших участие в работе конференции, будут выданы оформлены сертификаты участников, победителям – дипломы.

Иванов Иван Иванович

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

Руководители: В.В. Васильев, П.П. Петров

Тверской государственной университет, г. Тверь

Кафедра физической химии

Оптимизация геометрии 2,2-диметилгептана ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-C-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub>) и триметилпентилсульфида ((CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-S-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub>) была 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.

Таблица:

Заряды и объемы групп молекул (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-R-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub>, где R = C, S.

	CH <sub>3</sub> <sup>*1</sup>	CH <sub>3</sub> <sup>*2</sup>	R	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>
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 <sup>3</sup>							
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<sub>3</sub><sup>\*1</sup> метильный фрагмент в плоскости алкильной цепи.CH<sub>3</sub><sup>\*2</sup> метильные заместители с идентичным распределением электронной плотности у второго атома C в плоскости, перпендикулярной плоскости алкильной цепи.

Сравнение зарядов  $q(R)$  и объемов  $V(R)$  групп CH<sub>3</sub> в (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-S-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub> показало смещение электронной плотности ( $\rho(r)$ ) с CH<sub>3</sub>, находящейся в плоскости алкильной цепи в сторону двух CH<sub>3</sub>, расположенных перпендикулярно ей. Это не соответствует равномерному распределению  $\rho(r)$  в (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-C-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub> (табл.). В (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-S-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub> группа CH<sub>3</sub> фрагмента (CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub> проявляет меньшую электроотрицательность по сравнению с аналогичной группой в (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-C-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub>. На изменение  $V(\text{CH}_3)$  и параметров ближайшей к нему CH<sub>2</sub>  $V(\text{CH}_2)$  и  $q(\text{CH}_2)$  в (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-S-(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>-CH<sub>3</sub> оказывает влияние стерическое воздействие фрагмента (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>-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.

## Заявка на участие в

XXVIII Каргинских чтениях, Ежегодной всероссийской научно-технической конференции молодых ученых «Физика, химия и новые технологии»

Присылая работу на конференцию, автор автоматически гарантирует наличие авторских прав и дает право организаторам XXVIII Каргинских чтений на использование присланного материала в публичных источниках информации, в том числе размещение в информационно-коммуникационной среде университета и использование в печати

Фамилия	
Имя	
Отчество	
Полное название организации/учреждения	
Индекс, адрес (организации/учреждения)	
Телефон	
Направление, год обучения (класс)	
ФИО научного руководителя (полностью)	
E-mail	
Название доклада	
Направление работы	
Тип участия (очное/заочное, устное выступление/стенд)	
Ознакомлен(а) и согласен(на) с условиями представления материалов (Да, личная подпись автора)	
Ознакомлен(а) и согласен(на) с условиями публикации (Да, личная подпись автора)	
Согласие на обработку персональных данных (Да, личная подпись автора)	