**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 (кегль) – 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.

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

**ПРИМЕР ОФОРМЛЕНИЯ Приложение 2.**

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 ((СН3)3-C-(СН2)4-CH3) и триметилпентилсульфида ((СН3)3-S-(СН2)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 (*ρ*(*r*)) на ближайших метильных фрагментах. Распределение *ρ*(*r*) на функциональных группах гомологического ряда триметилалкилов представлено в материалах [5]. Однако сравнения групповых интегральных характеристик *ρ*(*r*) между представителями гомологических рядов в рамках используемых методов до сих пор не проводилось.

Сравнение зарядов *q*(*R*) и объемов *V*(*R*) групп СН3 в (СН3)3-S-(СН2)4-CH3 показало смещение электронной плотности с СН3, находящейся в плоскости алкильной цепи в сторону двух СН3, расположенных перпендикулярно ей. Это не соответствует равномерному распределению *ρ*(*r*) в (СН3)3-С-(СН2)4-CH3 (табл.). В (СН3)3-S-(СН2)4-CH3 группа СН3 фрагмента (СН2)4-CH3 проявляет меньшую электроотрицательность по сравнению с аналогичной группой в (СН3)3-С-(СН2)4-CH3. На изменение *V*(CH3) и параметров ближайшей к нему СН2 *V*(CH2) и *q*(CH2) в (СН3)3-S-(СН2)4-CH3 оказывает влияние стерическое воздействие фрагмента (СН3)3-S.

Таблица: Заряды и объемы групп молекул (СН3)3-R-(СН2)4-CH3, где R = C, S.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | CH3\*1 | CH3\*2 | R | CH2 | CH2 | CH2 | CH2 | СН3 |
| 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 Å3 |
| 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.

Полученные результаты квантово-химического исследования показывают, что смещение электронной плотности в сторону СН3 с S гораздо больше, чем с С, как и стерическое влияние серосодержащего трехметильного 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:

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