



## XXVI Каргинские чтения

Всероссийская научно-техническая конференция  
молодых учёных  
«Физика, химия и новые технологии»,  
посвященная 100-летию науки о полимерах



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

### Оргкомитет конференции:

Пахомов П.М. – председатель	Виноградова М.Г.	Русакова Н.П. – зам. председателя
Алексеев В.Г.	Зубарева Г.М.	Семенова Е.М.
Андрианова Я.В.	Каплунов И.А.	Солнышкин А.В.
Барabanова Е.В.	Лагусева Е.И.	Сульман М.Г.
Большакова Н.Н.	Мейсунова А.Ф.	Усанова З.И.
Вишневецкий Д.В.	Орлов Ю.Д.	Феофанова М.А.
Ворончихина Л.И.	Педько Б.Б.	Хижняк С.Д.

Конференция проводится **26-27 марта 2020 года в 10 часов в Актовом зале ТвГУ** (ул. Желябова, 33). В рамках XXVI Каргинских чтений **27.03.2020 с 16.00** в Актовом зале ТвГУ будет организована **секция краеведения**.

Научная программа конференции предусматривает проведение **устной (26 марта) и стендовой (27 марта) 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



К участию в работе конференции приглашаются школьники, студенты, аспиранты, сотрудники учебных заведений и предприятий Твери, Тверской области и других регионов России. Возраст участников конференции – **до 28 лет**. По результатам мероприятия будет выпущен сборник материалов, с присвоением ISBN и размещением в базе данных РИНЦ. Сборник XXV Каргинских чтений можно посмотреть на сайте [elibrary.ru](http://elibrary.ru) или на страничке ТвГУ [химико-технологического факультета](#).

Тезисы докладов и заявку участника необходимо прислать не позднее **29 февраля 2020 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)

Заявка участника содержит

- ❖ Ф.И.О. докладчика;
- ❖ Должность, год (курс) обучения, название организации или учебного заведения, где работает (учится) докладчик, город;
- ❖ Ученая степень, научное звание, должность, название организации или учебного заведения (место работы), научных руководителей;
- ❖ Название доклада;
- ❖ Адрес для переписки, E-mail, тел.;
- ❖ Вид доклада (устный или стендовый);

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](mailto:kargin_readings@tversu.ru) или по тел. 58-05-22 доб. 121 (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 2020 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.

Представленные на конференцию стендовые доклады должны быть выполнены на листе ватмана размером не более 1×1 м.

\* \* \* \*



Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных «Физика, химия и новые технологии» входит в перечень мероприятий, на которых проводится отбор для участия в программе «УМНИК – 2020» 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 – 2020» (для этого авторы рекомендованных работ из числа победителей должны будут зарегистрировать свою заявку на участие в программе «УМНИК – 2020» в апреле 2020 г.). Авторам всех докладов, принявших участие в работе конференции, будут выданы дипломы участников.

## 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 С 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.