Нижегородский государственный университет
им. Н.И. Лобачевского

Подготовка научной публикации

Лекция для студентов, аспирантов и научных сотрудников

С.К. Игнатов,
д.х.н., профессор ННГУ, ignatov@ichem.unn.ru

Нижний Новгород, 2011

Критерии качества выполненной научной работы

- Интересная проблема (вопрос фундаментальной важности, являющийся ключевым для решения других вопросов, актуальный для многих – это надо показать! *«Проблема должна быть интригующей !»*
- Новая идея для ее решения
- Грамотное, профессиональное воплощение этой идеи
- «Хороший» результат (Новые интересные факты, возможность объяснить ранее несвязанные явления, демонстрация новых возможностей, превосходящих имеющиеся)

  «Отрицательный» результат тоже может быть хорошим !

Критерии качества выполненной научной работы

(формулировки официальных документов)

- Актуальность
- Новизна
- Фундаментальность
- Практическая значимость

Критерии качества выполненной научной работы

- Интересная проблема
- Новая идея для ее решения
- Грамотное, профессиональное воплощение этой идеи
- «Хороший» результат

Разложите свою работу на эти пункты перед публикацией.

Напишите по каждому пункту формулировку (1-2-3 предложения по каждому пункту) из своей работы

Проанализируйте то, что написано, удаляя все неточные слова, фразы, нечеткие формулировки, сомнительные утверждения

Подготовка статьи в журнале

Основной вид научной публикации– статья в рецензируемом научном журнале

Другие способы публикаций не могут заменить статью:

тезисы конференций слишком краткие, не позволяют сообщить детали работы, подробно обсудить выводы

- монографии готовятся и публикуются слишком долго, требуют длительной и тщательной редакции, накопления большого материала

- препринты и статьи в открытых (электронных) журналах как правило не рецензируются

- статьи в сборниках обычно трудно доступны для читателя

Что и когда надо публиковать?

Результаты надо публиковать, когда вы уверены, что готовы сообщить читателям новую, интересную, важную для них информацию.

Обычно это означает, что работа отвечает (одновременно!) нескольким критериям:

-посвящена актуальной проблеме

-использует современные методы

-предлагает новые подходы или демонстрирует новые факты

-имеет новые, важные и четко сформулированные выводы

Статья должна нести четкий «месседж», т.е. сообщать новые факты и выводы, которые важно донести до научного сообщества.

Статья не должна выглядеть «отчетом о проделанной работе»

Что не надо публиковать?

- Из публикации необходимо исключить:
  - Неполные данные (например, не доведенные до конца серии измерений)
  - Результаты, случайно полученные в единичном эксперименте (за исключением сообщений об уникальных явлениях природы, даже само сообщение о которых является ценным для науки)
  - Результаты, «подтверждающие» хорошо известные теории
  - Незрелые выводы, основанные на фрагментарной информации
  - Далеко идущие предположения, «фантазии», не вытекающие напрямую из наблюдаемых данных
  - Планы на будущее

Результаты надо публиковать, когда вы уверены, что готовы сообщить читателям новую, интересную, важную для них информацию.

Где надо публиковать?

Высокорейтинговые международные журналы	
Достоинства	**Недостатки**
Делает работу известной и и доступной для мирового научного сообщества	Необходимость перевода на английский язык
Высокий импакт-фактор повышает возможности дальнейшего финансирования	Сложность прохождения рецензирования (высокие требования, многоступенчатая процедура)
Высокая скорость публикации (3-6 мес.), доступность через Web	Субъективизм многих зарубежных журналов в отношении российских авторов
Центральные российские журналы	
Входят в список ВАК, импакт-факторы расцениваются как достаточные для заявок на гранты	Длительная процедура публикации (1-2 года), часто отсутствие Web-версии
Если журнал переводится на англ.яз., статья становится доступной и для мирового сообщества	Отсутствие Web-интерфейсов для подачи рукописей и рецензирования, нестандартизованность этих процедур
Местные российские журналы (напр., Вестник ННГУ)	
Быстрая публикация с простым рецензированием	Как правило, не охватываются международными библиографическими системами, статья остается неизвестной мировому сообществу

Не всегда надо гнаться за рейтингом журнала!

Процесс публикации статьи

Написание и редактирование рукописи

Решение вопросов об авторстве, о ведущей организации, о ссылках и благодарностях

Выполнение правил для авторов

Оформление разрешения на публикацию (при необходимости)

Подача рукописи (почта или Web)

Редакция

Регистрация рукописи

Доработка статьи, дополнение материала, исправление ошибок, ответы на замечания рецензентов

Рецензирование (часто повторное или даже многократное)

Решение о принятии к печати

Публикация (ASAP, Web, затем бумажная версия)

Основные разделы публикации

- УДК (для российских журналов)
- Название статьи
- Авторы
- Организации, где работают авторы
- Реферат (+ иногда графический реферат)
- Ключевые слова (заменяют УДК)
- Текст статьи с рисунками, таблицами, списком литературы
- Благодарности (грантам, фондам, организациям)
- Дополнительная информация (Supporting information) - техническая или объемная информация, не вошедшая в статью, а публикуемая в интернет-версии в виде отдельного файла

Основные разделы публикации

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C

ARTICLE

pubs.acs.org/JPCC

Adsorption of Methyl Hydroperoxide (CH_3OOH) on Water Ice. Theoretical Study with Systematic Assessment of Coordination Modes

Stanislav K. Ignatov,[*,†,‡] Oleg B. Gadzhiev,[‡] Mikhail Yu. Kulikov,[§] Alexander I. Petrov,[⊥] Alexey G. Razuvaev,[‡] Michael Gand,[†] Alexander M. Feigin,[§] and Otto Schrems[†]

[†]Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research, Postfach 120161, D-27515 Bremerhaven, Germany

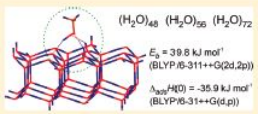
[‡]N.I. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 23 Gagarin Avenue, Nizhny Novgorod 603950, Russia

[§]Institute of Applied Physics of RAS, Nizhny Novgorod, 46 Ulyanova st, Nizhny Novgorod 603000, Russia

[⊥]Siberian Federal University, 81 Svobodnyi prosp., Krasnoyarsk 660041, Russia

Supporting Information

ABSTRACT: The low-temperature interaction between methyl hydroperoxide CH_3OOH (MHP) and the hexagonal water ice surface was studied using DFT (BLYP/6-311++G(d,p)) calculations. The structures, energies, and some thermodynamic properties of the molecular complexes between MHP and the water clusters $(H_2O)_{48}$, $(H_2O)_{56}$, $(H_2O)_{72}$ representing the surface fragments of the (0001), (10$\bar{1}$0), and (11$\bar{2}$0) crystallographic planes of the hexagonal oxygen lattice of the water ice *Ih* with proton ordering corresponding to Pisani's P-ordered model were calculated. The various modes of coordination and intrusion were studied using the extended set (up to 192 points for each plane) of the structures optimized at the semiempirical (PM3) level. The validity of the surface models was verified by the stability of the results obtained in the cluster series $(H_2O)_n$, (n = 48, 72, 192, 216) at the semiempirical level as well as by DFT calculations of selected structures at the BLYP/6-311++G(2d,2p) level.



INTRODUCTION

Adsorption of atmospheric trace gases on microcrystalline water ice particles in the upper layers of the Earth's atmosphere are considered today as one of the most important processes of atmospheric chemistry providing the occurrence of many key reactions that are impossible under the purely gas-phase conditions.[1,2] Such processes are, for example, the accumulation of atmospheric trace gases on ice particles of cirrus clouds in the upper troposphere and heterogeneous reactions on the surfaces of polar stratospheric cloud (PSC) particles in the stratosphere. Furthermore, interactions of atmospheric trace gases with surfaces of the ice shields in polar regions play a crucial role in tropospheric chemistry both in the Arctic and in Antarctica.[3] The primary steps of this accumulation are adsorption/desorption processes. In this respect, oxidants such as hydrogen peroxide H_2O_2 and methyl hydroperoxide CH_3OOH (MHP) are very interesting because they can undergo further reactions in the ice.[4] In polar regions, H_2O_2 and CH_3OOH are the only detectable hydroperoxides both in tropospheric air or snow and ice and hence have received special attention.[5] Methyl hydroperoxide is the most dominant species of organic peroxides over the ocean waters and is washed out of the troposphere by rain or snow fall. MHP is mainly produced in the atmosphere by the oxidation of CH_4 according to eqs 1 and 2.

$$CH_4 + HO(+O_2) \rightarrow CH_3O_2 + H_2O \quad (1)$$

$$CH_3O_2 + HO_2 \rightarrow CH_3OOH + O_2 \quad (2)$$

Whereas the adsorption of the H_2O_2 on the ice surface is described in detail,[6] the interaction of the MHP molecule with the ice surface, however, has so far only been scarcely studied.[7] Moreover, among the complexes formed by MHP, only several representatives are considered. From experimental study,[8] it follows that the water solubility of MHP is not high in comparison with H_2O_2 (the corresponding Henry's constant of MHP is approximately 200 times lower than for H_2O_2). Thus, during the MHP interaction with the surface of ice particles, the adsorption modes of MHP should prevail over the solubility. The corresponding value for standard enthalpy of solution $\Delta H^0(298)$ obtained in ref 8 was −43.6 kJ mol^{-1}, close to −44.2 kJ mol^{-1} obtained in earlier studies of Lind and Kok.[9,10] The MHP dimer was studied by Alkorta and Elguero,[11] Du et al.,[12] and by Kulkarni et al.[13] with emphasis on the chirality of the complex structures. It was shown that the BSSE-corrected binding energy at the MP2/6-311++G(2d,2p) level was 38.6 kJ mol^{-1} (BSSE + ZPE-corrected value 31.5 kJ mol^{-1}).[13] The MHP−H_2O_2 complex was described by Du and Zhou.[14] The most favorable geometry of the complex was found to be a five-membered H-bonded ring structure with dangling CH_3 and peroxide HO fragments with a binding energy of 38.8 kJ mol^{-1} at the MP2/6-31++G(2d,2p) level (BSSE + ZPE corrected value 22.7 kJ mol^{-1}).[14] The most detailed study on the interaction of MHP with water clusters was performed

Received: December 22, 2010
Revised: March 24, 2011

ACS Publications © XXXX American Chemical Society

substitution of the H_2O molecules in the internal bilayers (91 kJ mol^{-1}).

4 The good convergence of results obtained for the clusters $(H_2O)_{48}$ and $(H_2O)_{56}$ with those obtained for the larger models shows that DFT within the cluster approximation is a model good enough to be used on its own without any corrections for the environmental effects of the remaining part of the ice crystal. These clusters permit already a good presentation of the different coordination modes and demonstrate quite good agreement in comparison with the extended models. Extension of the models with clusters containing up to 216 water molecules does not result in significant changes of the coordination energy.

ASSOCIATED CONTENT

Supporting Information. Cartesian coordinates for the DFT-optimized structures in Figures 2 and 4−6. This material is available free of charge via the Internet at http://pubs.acs.org.

AUTHOR INFORMATION

Corresponding Author
*E-mail: ignatov@ichem.unn.ru.

ACKNOWLEDGMENT

This work was partially supported by the Russian foundation for Basic Research (projects No. 11-03-00085, 09-03-00706a, and 10-05-01112). S.K.I. and M.Y.K. thank the German Academic Exchange Service (DAAD) and the Alfred Wegener Institute for Polar- and Marine Research, Bremerhaven for fellowship supports. A.I.P. is thankful to SFU Super−computer Centre for generous donation of CPU−time.

REFERENCES

(1) Wayne, R. P. *Chemistry of Atmospheres*; Clarendon Press: Oxford, 1991.
(2) Girardet, C.; Toubin, C. *Surf. Sci. Rep.* 2001, *44*, 159.
(3) Sennikov, P. G.; Ignatov, S. K.; Schrems, O. *ChemPhysChem* 2005, *6*, 392.
(4) Frey, M. M.; Hutterli, M. A.; Chen, G.; Sjostedt, S. J.; Burkhart, J. F.; Friel, D. K.; Bales, R. C. *Atmos. Chem. Phys.* 2009, *9*, 3261.
(5) Riedel, K.; Weller, R.; Schrems, O.; König-Langlo, G. *Atmos. Environ.* 2000, *34*, 5225.
(6) Ignatov, S. K.; Sennikov, P. G.; Jacobi, H.-W.; Razuvaev, A. G.; Schrems, O. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2003, *5*, 496.
(7) Kambourova, M. A.; Nizkorodov, S. A.; Gerber, R. B. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2010, *107*, 6600.
(8) O'Sullivan, D. W.; Lee, M.; Noone, B. C.; Heikes, B. G. *J. Phys. Chem.* 1996, *100*, 3241.
(9) Lind, J. A.; Kok, G. L. *J. Geophys. Res., [Atmos.]* 1986, *91*, 7889.
(10) Lind, J. A.; Kok, G. L. *J. Geophys. Res., [Atmos.]* 1994, *99*, 21119.
(11) Alkorta, I.; Elguero, J. *J. Chem. Phys.* 2002, *117*, 6463.
(12) Du, D.; Fu, A.; Zhou, Z. *Chem. Phys. Lett.* 2004, *392*, 162.
(13) Kulkarni, A. D.; Rai, D.; Bartolotti, L. J.; Pathak, R. K. *J. Mol. Struct.: Theochem.* 2007, *824*, 32.
(14) Du, D.; Zhou, Z. *Int. J. Quantum Chem.* 2005, *106*, 935.
(15) Kulkarni, A. D.; Rai, D.; Bartolotti, L. J.; Pathak, R. K. *J. Chem. Phys.* 2009, *131*, 4310.
(16) Fry, J. L.; Matthews, J.; Lane, J. R.; Roehl, C. M.; Sinha, A.; Kjaergaard, H. G.; Wennberg, P. O. *J. Phys. Chem. A* 2006, *110*, 7072.
(17) Bach, R. D.; Su, M.-D.; Schlegel, H. B. *J. Am. Chem. Soc.* 1994, *116*, 5379.
(18) Urakawa, A.; Bürgi, T.; Skrabal, P.; Bangerter, F.; Baiker, A. *J. Phys. Chem. B* 2005, *109*, 2212.
(19) Buch, V.; Groenzin, H.; Li, I.; Shultz, M. J.; Tosatti, E. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2008, *105*, 5669.
(20) Fletcher, N. H. *Philos. Mag. B* 1992, *66*, 109.
(21) Ignatov, S. K.; Razuvaev, A. G.; Sennikov, P. G.; Schrems, O. *J. Mol. Struct.: Theochem.* 2009, *908*, 47.
(22) Pisani, C.; Casassa, S.; Ugliengo, P. *Chem. Phys. Lett* 1996, *253*, 201.
(23) Casassa, S.; Ugliengo, P.; Pisani, C. *J. Phys. Chem.* 1997, *106*, 8030.
(24) Marinelli, F.; Allouche, A. *Chem. Phys.* 2001, *272*, 137.
(25) Hammer, S. M.; Panisch, R.; Kobus, M.; Glinnemann, J.; Schmidt, M. U. *Cryst. Eng. Comm.* 2009, *11*, 1291.
(26) Kroes, G.-J. *Surf. Sci.* 1992, *275*, 365.
(27) Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Montgomery Jr., J. A.; Vreven, T.; Kudin, K. N.; Burant, J. C.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Barone, V.; Mennucci, B.; Cossi, M.; Scalmani, G.; Rega, N.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Klene, M.; Li, X.; Knox, J. E.; Hratchian, H. P.; Cross, J. B.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Ayala, P. Y.; Morokuma, K.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Zakrzewski, V. G.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cui, Q.; Baboul, A. G.; Clifford, S.; Cioslowski, J.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Challacombe, M.; Gill, P. M. W.; Johnson, B.; Chen, W.; Wong, M. W.; Gonzalez, C.; Pople, J. A. *Gaussian 03*, Rev. E.01; Gaussian, Inc.: Pittsburgh PA, 2007.
(28) Schmidt, M. W.; Baldridge, K. K.; Boatz, J. A.; Elbert, S. T.; Gordon, M. S.; Jensen, J. H.; Koseki, S.; Matsunaga, N.; K.A., N.; Su, S. J.; Windus, T. L.; Dupuis, M.; Montgomery, J. A. *J. Comput. Chem.* 1993, *14*, 1347.
(29) Granovsky, A. A. *PC GAMESS*, Firefly version 7.1.G, http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html. (access date 03.24.2011)
(30) Ignatov, S. K. *MOLTRAN*: A program for molecular visualization and thermodynamic calculations; Nizhny Novgorod: N.I. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 2009. http://ichem.unn.ru/Moltran. (access date 03.24.2011)
(31) Feistel, R.; Wagner, W. *Geochim. Cosmochim. Acta* 2007, *71*, 36.
(32) Somnitz, H. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2008, *11*, 1033.
(33) Thierfelder, C.; Hermann, A.; Schwerdtfeger, P.; Schmidt, W. G. *Phys. Rev. B* 2006, *74*, 045422(1).
(34) Thierfelder, C.; Schmidt, W. G. *Phys. Rev. B* 2007, *76*, 195426(1).

Название научной работы (статьи, гранта, доклада) требует особого внимания!

- В названии должна звучать проблема! И звучать весомо!
- Общность проблематики, необходимая для того, чтобы заинтересовать аудиторию
- Точность и корректность формулировок
- Краткость
- Отсутствие новых сокращений
- Отсутствие фраз типа «Исследование…», «Изучение…» - работа не про изучение, а про природу!

Общее правило – название должно раскрывать ТЕМУ сообщения

Название

«Правильное»

- Электрофизические свойства углеродных нанолуковиц
- Реакции УФ фильтров хрусталика человеческого глаза
- Внутренние и внешние движущие силы в реакции Дильса-Альдера
- Генезис патогенных минералов в организме человека

«Неправильное»

- Некоторые вопросы разработки акусто-оптических сенсоров
- Исследование вольфраматных каталитических систем
- Изучение влияния растворителя на реакцию изомеризации молекулы пероксида водорода
- Теоретические исследования возможности образования активных форм кислорода в комплексе порфирин-гистидин
- Расчет методом DFT/B3LYP спектров ИК кластера Pd4 в большом канале цеолита ZSM-5

Авторы, организация, адрес, благодарности финансирующим организациям

Очень важно сразу четко решить эти вопросы, чтобы:

– исключить источник обид и скандалов с коллегами

- обеспечить возможность отчетности перед финансирующими организациями

- спланировать работу на будущее, которая часто зависит от того, какая часть работы публикуется (т.е. от авторства и организации)

Авторство

Общее правило – необходимо включить ВСЕХ авторов, которые сделали вклад в работу, кроме технического (верстка, ремонт оборудования, …)

На первом месте указывается автор, который выполнял работу (или предлагал ее замысел) и писал текст статьи.

Затем перечисляются авторы в порядке величины вклада в работу.

Западная традиция: Последний автор - почетное место для «Шефа» (т.е. человека, осуществлявшего общее руководство без непосредственного участия в экспериментах, расчетах и т.д.)

Не надо бояться включать всех авторов, даже если их много – выгода от этого больше, чем выгода от формальной отчетности по «числу страниц на человека»!

Текст статьи

- Введение
- Методическая часть
  «Материалы и методы», «Методика измерений», «Теория» …
- Результаты (или Результаты и обсуждение)
- Обсуждение результатов
- Выводы (или заключение)
- Список литературы
- Таблицы
- Рисунки
- Подписи к рисункам

При выборе названий для секций необходимо следовать традициям данного журнала

Введение

- Формулировка проблемы

  («Проблема должна интриговать!»)
- Обзор предшествующих работ

  (отсутствие этого – признак дилентантизма!)
- Определение места вашей работы среди выполненных и выполняемых исследований

  (одна работа, как правило, не может решать всю проблему!)
- Формулировка цели и замысла исследования

Методологическая часть

- Теория
- Методы
- Материалы, оборудование
- Схемы установок
- Описание программного обеспечения

Обсуждение основного замысла исследования – здесь или во Введении?

Результаты. 1.

- Детальное описание всех результатов (в отличие от сообщения на конференции).
- Ссылки на таблицы и рисунки
- Ссылки на Supporting Information
- Наиболее интересные данные
  - Таблицы
  - Графики зависимостей
  - Фотографии экспериментальных результатов

Главное требование к результатам – они должны воспроизводиться!

Результаты. 2.

Следует помнить – КАЖДЫЙ ваш результат, опубликованный в журнале, будет проверен!

Опубликованные в журнале результаты будут доступны для анализа и проверки на протяжении десятилетий для десятков и сотен людей, даже при узкой специализации статьи.

Нет нужды подтасовывать результаты – достаточно их правильно обсудить:

Очень часто «неудобный» результат гораздо интереснее «удобного» и тем более подтасованного. С этой точки зрения «подчистка» результатов просто не нужна – гораздо выгоднее иметь дело с результатами, которые отражают саму природу, а не наши пожелания к ней.

«ПРАВДУ ГОВОРИТЬ ЛЕГКО И ПРИЯТНО!» (С)

Таблицы

- Следует с самого начала придерживаться стиля выбранного журнала
- Современный стиль в большинстве научных журналов –минимум рамок (линий между клетками), большое количество разнородной информации и необходимое количество примечаний:

TABLE 6: Calculated Energies and Thermodynamic Parameters of Transition States for the Bimolecular Elementary Reactions of Primary Hydrolysis Calculated at the B3LYP/6-311++G(2d,2p) Level

elementary reaction	geometry of transition state	ν_{im},[a] kJ/mol	$E_{tot}^{\ddagger}$, au	$\Delta E^{\ddagger}$,[b] kJ/mol	$\Delta(E^{\ddagger}+ZPE)$,[c] kJ/mol	$\Delta H^{\ddagger}$, kJ/mol	$\Delta G^{\ddagger}$, kJ/mol
$SiCl_4 + H_2O \rightarrow SiCl_3OH + HCl$	TS1a, Figure 1a	302i	−2207.0526212	105.0	107.0	101.1	142.5
$SiCl_3OH + H_2O \rightarrow SiCl_2(OH)_2 + HCl$	TS1b, Figure 1b	182i	−1822.6956728	76.0	85.8	78.6	129.5
$SiCl_2(OH)_2 + H_2O \rightarrow SiCl(OH)_3 + HCl$	TS1c, Figure 1c	174i	−1438.3285975	74.1	85.1	78.0	127.5
$SiCl(OH)_3 + H_2O \rightarrow Si(OH)_4 + HCl$	TS1d, Figure 1d	87i	−1053.9669023	55.5	71.1	63.4	115.6

[a] Imaginary frequency, cm^{-1}. [b] Activation energy. [c] Activation energy including the ZPE.

Из таблиц исключить все величины, которые не относятся к теме статьи и выводам, обсуждаемым в работе!

Таблицы

Table 5. Vibrational frequencies (ν/cm^{-1}), absolute intensities in the IR spectrum (I/km mol^{-1}), and assignment of vibrations of the $F_3Si—O—SiF_3$ molecule calculated by the B3LYP/6-311G(2d) method and experimental frequencies of absorption bands of hexafluorodisiloxane in the gas phase

Band	Assignment	Calculation		Experiment[a], ν	
		ν	I	I [b]	II [c]
1	$\omega(F_3Si) + \omega(SiF_3)$	12.5	0.1		
2	$\omega(F_3Si) - \omega(SiF_3)$	18.1	0.0		
3	$\delta(Si—O—Si)$	57.2	0.3	85 w	
4	$\rho(F_3Si) + \rho(SiF_3)$	210.0	0.0	179 m	
5	$\rho(F_3Si) - \rho(SiF_3)$	210.8	1.1		
6	$\rho(F_3Si) + \rho(SiF_3)$	231.5	0.9	(227)[d] vw	
7	$\delta_{as}(F_3Si) - \delta_{as}(SiF_3) + \delta(Si—O—Si)$	275.5	3.1		
8	$\delta_{as}(F_3Si) - \delta_{as}(SiF_3)$	306.1	20.2		304 w
9	$\delta_{as}(F_3Si) + \delta_{as}(SiF_3)$	344.4	17.8	(343)[d] vw	375 w
10	$\nu_s(F_3Si) + \nu_s(SiF_3)$	347.1	0.1		388 w
11	$\delta_s(F_3Si) - \delta_s(SiF_3)$	394.3	152.7	402 m	401 s
12	$\rho(F_3Si) - \rho(SiF_3)$	415.9	80.5	434 m/s	432 m/s
13	$\delta(Si—O—Si) + \rho(F_3Si) + \rho(SiF_3)$	442.7	34.7	601 w	595 vw
14	$\delta_s(F_3Si) + \delta_s(SiF_3) + \nu_s(Si—O—Si)$	634.2	21.1	631 m/s	660 vw
15	$\nu_s(F_3Si) - \nu_s(SiF_3)$	822.6	95.7	838 m/s	838 m/s
16	$\nu_s(F_3Si) + \nu_s(SiF_3) + \nu_s(Si—O—Si)$	936.4	33.6	(940)[d] w	912 w
17	$\nu_{as}(F_3Si) - \nu_{as}(SiF_3)$	1005.6	50.3		981 m
18	$\nu_{as}(F_3Si) - \nu_{as}(SiF_3)$	1006.4	12.4		
19	$\nu_{as}(F_3Si) + \nu_{as}(SiF_3)$	1018.5	359.4	989 m	1028 vs
20	$\nu_{as}(F_3Si) + \nu_{as}(SiF_3) + \delta(Si—O—Si)$	1022.3	338.2		
21	$\nu_{as}(Si—O—Si)$	1168.8	692.3	1206 s	1200 vs

[a] W, m, and s are weak, medium, and strong bands, respectively; v is very.
[b] See Ref. 19. Two very weak broadened bands (555 and 453 cm^{-1}) in the experimental spectrum[19] cannot be assigned on the basis of quantum-chemical calculations.
[c] See Ref. 3. The weak bands in the experimental spectrum lying higher than 1200 cm^{-1} (integral frequencies and overtones) are not presented.
[d] The bands detected only in the crystalline state.

Таблицы и рисунки

- Наиболее интересные данные
  - Рисунки
  - Фотографии экспериментальных результатов
- Таблицы или Графики?
  - Таблицы не должны быть перегруженными
  - Как правило, все значения в таблице должны быть обсуждены в тексте (за исключением однотипных, образующих серию)
  - Если таблица большая или их много, таблицы можно привести в Дополнительной информации (Supporting Information)

Обсуждение результатов

- Сравнить результаты измерений с данными других авторов
- Сравнить экспериментальные результаты с предсказаниями существующих теорий
- Сравнить результаты развиваемой теории с экспериментальными данными
- Как изменяются результаты при изменении параметров измерений, расчетов, внешних условий? Есть ли тенденции?
- Можно ли интерпретировать результаты, используя дополнительные регрессии? Теоретические модели? Качественные описания?
- Каковы частные случаи развиваемой теории?
- Какие выводы можно сделать из полученных результатов?
- Что нового говорят они об исследуемой системе?
- Объясняют ли они какие-либо эффекты, свойства системы?
- Можно ли зарегистрировать предсказываемые эффекты?
- Можно ли использовать эти результаты на практике?
- Важны ли они для решения других проблем? Каких?

Выводы или заключение

- Эта секция нужна не всегда
- Лучше меньше, но более общие и важные
- Выводы призваны акцентировать внимание читателя на том, что автор считает новым и важным в выполненной работе
- Основные выводы уже должны быть подробно обсуждены в секции «Результаты и выводы»
- Следует различать выводы и результаты работы. Если акцент на результатах, можно назвать секцию «Заключение»

Список литературы и ссылки

- В статье необходимо процитировать ВСЕ источники, которые существуют в данной области (российские авторы этим часто пренебрегают, в международных журналах неполнота цитирования – наиболее частое замечание).
- Необходимо четко следовать формату журнала при оформлении ссылок
- Рекомендуется использовать персональные библиографические системы (EndNote, RefMan…) – они гарантируют полноту библиографии и правильность формата.

Логика изложения

- Главные требования к тексту научной статьи – точность формулировок, логика изложения и научный стиль.

Проанализируйте КАЖДОЕ предложение:

- 1. Каков его смысл? Есть ли он?
- 2. Логично ли оно построено? Нет ли в нем абсурдного утверждения? Неточности? Двойного толкования?
- 3. Вытекает ли оно из предшествующего предложения, абзаца?
- 4. Какой вывод из него последует в следующем предложении, абзаце?

Научный стиль изложения

- Исключить бытовые термины («высчитываем» вместо «проводим расчет», «меряем» вместо «проводим измерение», «градусник»…)
- Исключить научный и технический жаргон (названия деталей, узлов и операций, которые не являются общепринятыми или допускают двойное толкование – «машина» вместо «компьютер»)
- Попытаться исключить ВСЕ(!) вводные слова и выражения («При этом», «Легко видеть», «Таким образом»…). Оставить только те, исключение которых изменяет смысл или логику высказывания.
- Проанализировать, является ли смысл КАЖДОГО предложения, однозначным, четко определенным, не допускает двойного толкования.
- Удалить из текста все повторы - фразы, которые «перепевают» один и тот же смысл на разные лады. Статью будет читать профессионал, который не нуждается в напоминаниях уже сказанного!

Статья на английском языке

- Если статья пишется в международный журнал, рекомендуется писать ее по-английски с самого начала. Построение фраз в английском языке иное, чем в русском. Перевод (особенно неопытным переводчиком, или переводчиком, не являющимся специалистом в данной области) обычно приводит к искажению логики изложения, делает текст корявым.

- В научных статьях обычно используются готовые шаблоны выражений, клише, которых не очень много. Овладение ими позволяет писать текст гораздо лучше, чем дословный перевод.

- Наилучшие результаты дает написание текста с использованием «профессиональных клише» на английском, а затем «полировку» мелких грамматических неточностей переводчиком или коллегой - носителем языка.

Техническое воплощение

- Ввод текста
  - MS Word
  - OpenOffice
- Ввод математических формул
  - MathType
  - TeX
- Ввод химических формул
  - ChemOffice (ChemDraw)
  - ISIS Draw
- Графики
  - Origin (стандарт de facto)
  - Surfer
- Схемы и чертежи
  - CorelDraw
  - Компас
- Фотографии
  - TIFF
  - JPEG

  (разрешение не ниже 300 dpi)
- Вставка иллюстраций
  - Грабберы (CorelCapture…)

Наиболее удачные результаты получаются при разумном сочетании нескольких программ!

Нижегородский инновационный центр

Подготовка выступления на научной конференции

Лекция для студентов, аспирантов и научных сотрудников

С.К. Игнатов,
д.х.н., профессор ННГУ, ignatov@ichem.unn.ru

Нижний Новгород, 2009

Что нужно, чтобы лекция была «хорошей»?

- Насыщенность (отсутствие «воды», общеизвестных фактов, новые идеи, факты, взгляды, подходы. Сообщение того, что важно и интересно для слушателей.)
- Логичность (мысли и выводы должны логично следовать одна из другой, выводы должны быть логически обоснованы, понятны. Новые идеи должны подаваться так, чтобы у слушателя возникало чувство «открытия», «озарения»)
- Психологическая выверенность («чувство аудитории», понимание того, что от тебя ожидают, использование психологических приемов управления вниманием, эмоциями)

Тип слушателей (коммуникативный профиль)

- Эмоциональный (25%)
- Деятельный (35%)
- Интуитивный и адаптивный (5-15%)
- Аналитический (25-40%, в научной среде больше)

Несмотря на то, что «аналитики» представляют далеко не всю аудиторию, научная лекция должна ориентироваться на

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ТИП ВОСПРИЯТИЯ !

Тип сообщения

- Научное сообщение
  (доклад на научной конференции)
- Инвестиционный проект
  (поиск финансирования, спонсора, представление заявки на грант)
- Отчет о выполненной работе
  (результаты инвестиционного проекта, гранта)
- «Защита»
  (курсовой работы, диплома, диссертации)

- Образовательная лекция
- Бизнес-презентация (продукта, проекта…)

Начало доклада (заголовок, титульный слайд)

Задача этого слайда –

1. Заинтересовать слушателя (НАЗВАНИЕ!)
2. Представить автора (коллектив, организацию) так, чтобы их запомнили
3. Настроить аудиторию

- Организация или конференция
- Эмблема
- Название работы (должно вызывать интерес, быть продуманным, точным, не должно вводить в заблуждение)
- Имя автора
- Место работы и контактный адрес (email?)
- Опорный рисунок (заинтересовать!)

Первые фразы

- Очень важно, чтобы первые фразы доклада были:
  - Безукоризненными с научной точки зрения
  - Точными
  - Стилистически правильными
  - Произнесены уверенно, четко и громко

- Подготовка – перед началом доклада продумать (выписать) начальную фразу, «вычитать» ее, удаляя все лишнее и исправляя неправильные выражения и проговорить несколько раз.

Введение

- Формулировка проблемы

  («Проблема должна интриговать!»)

- Обзор предшествующих работ

  (отсутствие этого – признак дилентантизма!)

- Определение места вашей работы среди выполненных и выполняемых исследований

  (одна работа, как правило, не может решать всю проблему!)

- Формулировка цели и замысла исследования

Научное сообщение не должно выглядеть как «защита» - нежелательность заголовков «Актуальность», «Научная новизна» и т. д. – формулировки должны быть более изящны, научны.

Методологическая часть

- Теория
- Методы
- Материалы, оборудование

Обсуждение основного замысла исследования – здесь или во Введении?

Результаты

- Наиболее интересные данные
  - Рисунки
  - Фотографии экспериментальных результатов
- Таблицы или Графики?
  - Таблицы не должны быть перегруженными
  - Быть готовым обсудить значения в таблице
  - Если таблица большая, ее лучше заменить графическим материалом (графиком)

Таблица - неправильно!

Система	b3lyp E, a.u.	b3lyp E, a.u.	TPSS E, a.u.	VSXC E, a.u.	PBE E, a.u.	BP86 E, a.u.
	aug-pc3			6-311+G(2d)		
O_2	-150.3992285	-150.374660	-150.3967182	-150.416526	-150.234046	-150.384366
2NO	-259.9111206	-259.868534	-259.9075262	-259.940472	-259.606995	-259.880133
$2NO+O_2$	-410.3103491	-410.243194	-410.3042444	-410.356998	-409.841040	-410.264499
$2NO_2$	-410.3606764	-410.291924	-410.3702954	-410.415572	-409.922802	-410.341701
trans,trans ONOONO(TT)	-410.3228757	-410.255526	-410.3418019	-410.381638	-409.892516	-410.312956
TT-TS	-410.2717951	-410.204241	-410.2940256	-410.333922	-409.847492	-410.266761
O_2NNO_2	-410.3819863	-410.313733	-410.3985494	-410.445742	-409.958404	-410.375047
cis,trans-ONOONO(CT)	-410.3247738	-410.257812	-410.3453973	-410.388733	-409.895870	-410.316257
CT-TS1	-410.3010853	-410.233429	-410.3288122	????	?????	????
CT-INT(ПС)	-410.3080913	-410.240027	????	-410.392236	-409.937331	?????
CT-TS2	-410.3004685	-410.231870	-410.324539	-410.376501	-409.883383	-410.300468
trans-$ONONO_2$	-410.3635624	-410.295972	-410.3778482	-410.421359	-409.933299	-410.351736
cis,cis-ONOONO(CC)	-410.3268841	-410.260264	-410.3497053	-410.401668	-409.900192	-410.320476
CC-TS1	-410.3230641	-410.256033	-410.3425571	-410.389129	-409.894185	-410.313891
CC-INT		-410.275834	-410.3732214	-410.426173	-409.932114	-410.349331
CC-TS2	-410.3296772	-410.261894	-410.3583037	-410.420036	-409.918393	-410.335243
cis,90-$ONONO_2$	-410.3593035	-410.291747	-410.3790583	-410.426469	-409.937343	-410.354822
CC-CT - TS1 (exo)		-410.241771	-410.3297628	-410.376089	-409.879018	-410.299768
CC-CT - TS2 (endo)	-410.3071113	-410.240356	-410.3281542	-410.376212	-409.877444	-410.298135
CT-TT - TS1 (exo)		-410.238520	-410.3243511	-410.364629	-409.873584	-410.294397
CT-TT - TS2 (endo)	-410.3050314	-410.237998	-410.3240062	-410.366232	-409.873336	-410.294072
TS-cc-iTS2	-410.3109691	-410.242790	-410.3424314	-410.400509	-409.902718	-410.319309
TS-cis-trans-$ONONO_2$	-410.3561396	-410.288710	-410.3702291	-410.417749	-409.925080	-410.343532
TS-O_2NNO_2-i-trans-$ONONO_2$		-410.262391		??????	????	-410.333196
TS-CC-i-CT		-410.237536		-410.367849	-410.299496	-410.299496

Таблицы

Неправильно:

Система	E, a.u.	E_{rel}, a.u.	E_{rel}, кДж/моль	ZPE, кДж/моль	$\Delta_r H^0(0K)$, кДж/моль	$\Delta_r H^0(0K)+\Delta$, кДж/моль
O2	-150.374660			9.746		
2NO	-259.868534			23.39		
2NO+O2	-410.243194	0	0	33.13	0	0
TT-TS	-410.204241	0.0389526	105.6	44.74	117.28	131.3
CT-TS1	-410.233429	0.0097647	26.5	45.82	39.18	53.2
CT-TS2	-410.231870	0.0113238	30.7	51.56	49.14	63.2
CC-TS1	-410.256033	-0.0128387	-34.8	47.46	-20.50	-6.2
CC-TS2	-410.261894	-0.0187003	-50.7	50.28	-33.58	-19.6
CC-CT - TS1 (exo)	-410.241771	0.0014233	3.9	47.22	17.95	31.9
CC-CT - TS2 (endo)	-410.240356	0.0028378	7.7	47.17	21.74	35.7
CT-TT - TS1 (exo)	-410.238520	0.0046736	12.6	47.07	26.62	40.6
CT-TT - TS2 (endo)	-410.237998	0.0051959	14.1	47.16	28.12	42.1
TS-cc-iTS2	-410.242790	0.0004041	1.1	47.13	15.10	29.1
TS-cis-trans-ONONO2	-410.288710	-0.0455158	-123.5	54.69	-101.92	-87.9
TS-o2nno2-i-trans-onono2	-410.262391	-0.0191970	-52.1	53.13	-32.08	-18.1
TS-CC-i-CT	-410.237536	0.0056584	15.1	49.42	31.64	45.6

Таблица - Неправильно:

Реакция	B3LYP	B3LYP	TPSS	VSXC	PBE	BP86	Эксперимент
	aug-pc3			6-311+G(2d)			
				NO			
	1974	1955	1872	1911	1859	1872	1904
				O_2			
	1638	1629	1544	1574	1536	1550	1580
				NO_2			
A_1	769	761	736	749	733	737	750
A_1	1392	1381	1317	1346	1313	1325	1318
B_2	1695	1672	1599	1644	1606	1632	1618
				N_2O_4			
A_u	88	87	83	90	84	83	82
B_{2u}	225	227	178	222	192	188	265
A_g	293	293	258	278	262	260	265
B_{3u}	444	443	391	387	397	393	425
B_{3g}	497	497	450	461	456	451	480
B_{2g}	702	704	636	644	641	634	657
B_{1u}	763	758	721	721	725	721	755
A_g	851	843	814	819	813	810	807
B_{1u}	1305	1298	1242	1265	1256	1244	1261
A_g	1448	1437	1392	1418	1398	1388	1383
B_{3g}	1785	1765	1699	1752	1723	1702	1718
B_{2u}	1817	1798	1729	1782	1753	1731	1757

Таблица - Правильно:

Calculated TD properties of the $H_2O \cdot O_3$ complex (CARV model, PES: 315900 points, 14016 unique)

TD property	RRHO	CARV	Corrected CARV
$\Delta_r E$, kJ mol^{-1}	-8.34	-8.34	-8.34
$\Delta_r U^0(298)$, kJ mol^{-1}	-0.47	-5.02	-5.02
$\Delta_r H^0(298)$, kJ mol^{-1}	-2.95	-7.49	-7.49
$\Delta_r S^0(298)$, J K^{-1} mol^{-1}	-80.1	-66.82	-67.71
$\Delta_r G^0(298)$, kJ mol^{-1}	20.95	12.43	12.96
$K^0(298)$	$2.14 \cdot 10^{-4}$	$6.65 \cdot 10^{-3}$	$5.97 \cdot 10^{-3}$

Comparison with other studies:

$K^0(288) = 3.55 \cdot 10^{-3}$ [Frost G. F., Vaida V. *J. Geophys. Res.* **1995**, *100*, 18803].

$K^0(298) = 1.38 \cdot 10^{-3}$ [Tsuge M., Tsuji K., Kawai A., Shibuya K. *J. Phys. Chem. A* **2007**, *111*, 3540].

Таблица - Правильно:

Сравнение новой модели с результатами других методов и экспериментом

Model	$\Delta_r H^0(298)$	$\Delta_r S^0(298)$	$\Delta_r G^0(298)$	$K_p \cdot 100$
ЖРГО [1]	-9.4	-87.8	23.4	**0.05**
ЖРГО (2d2p) (немасштабир.)	-13.3	-86.9	19.2	**0.21**
ЖРГО (3dfd3p) (немасштабир.)	-13.3	-86.9	19.2	**0.21**
ЖРГО (2d2p) (масштабир. 0.95)	-13.4	-84.7	18.2	**0.29**
ЖРГО (3df3p) (масштабир. 0.95)	-14.9	-83.4	16.2	**0.53**
Квантовая ТД [2]	-12.8	-81.5	17.6	**0.35**
КЛАРВ/КГК (2d2p)	-15.7	-73.6	11.7	**2.28**
КЛАРВ/КГК (3df3p)	-15.1	-72.8	12.1	**2.01**
Корректир. КЛАРВ/КГК (2d2p)	-15.6	-76.3	12.8	**1.58**
Корректир. КЛАРВ/КГК (3df3p)	-14.9	-75.4	13.2	**1.40**
Эксперимент [3]	**-15.0**	**-77.8**	**14.0**	**1.10**

[1] Munoz-Caro et al, *J.Phys.Chem. A*, 1997, **101**, 4128. [2] Sabu et al, *J.Phys.Chem. A*, 2005, **109**, 1836. [3] Curtiss et al, *J.Chem.Phys.*, 1979, **71**, 2703.

Таблица - Правильно:

Содержание *n*NO у пациентов с различной выраженностью ринореи

Таблица 1. Содержание *nNO* у пациентов с различной выраженностью ринореи

	Назальный [NO], ppb		
	Без ринореи	**Ринорея умеренная**	**Ринорея выраженная**
Число измерений (пациентов)	19	18	15
Среднее ± СО среднего	95 ± 3	107 ± 7	121 ± 6
Размах выборки	68–127	52–187	71–150
Стандартное отклонение	14,8	29,6	21,9
Критерий Фишера	$F = 5.47$, $p = 0.007$		

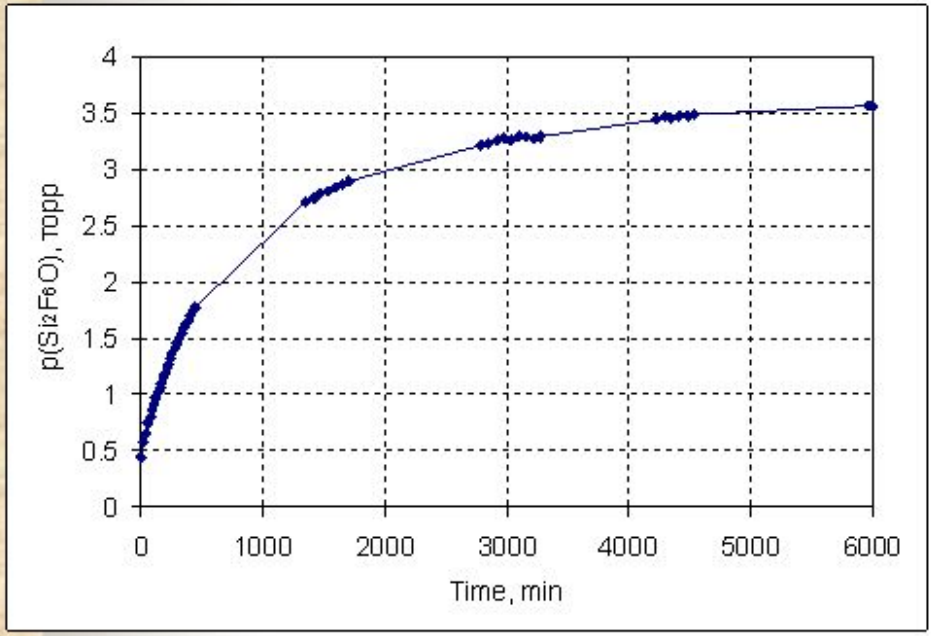
Графики или таблицы?

TD parameters of SiF_4 hydrolysis reactions

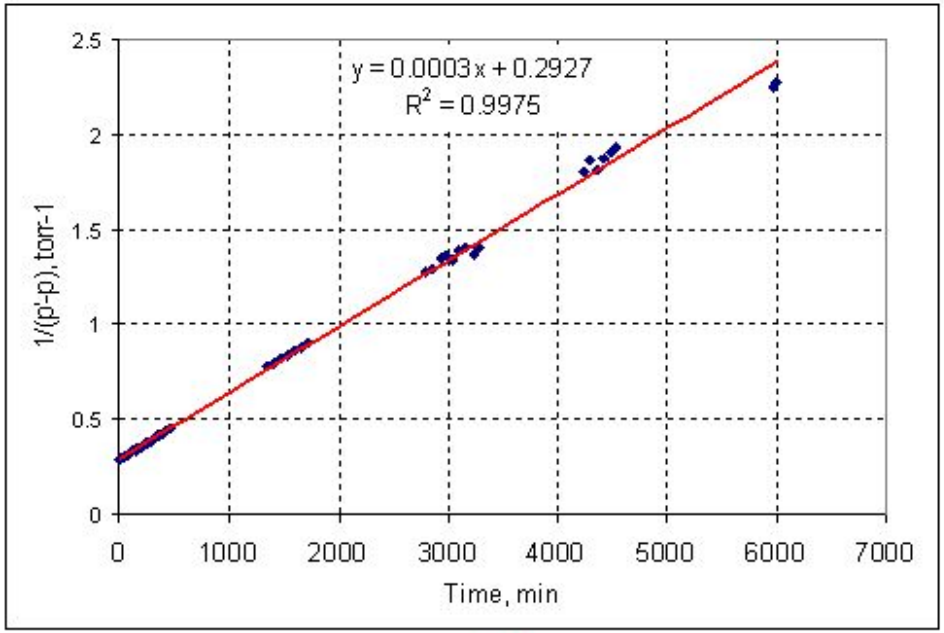
Reaction	$\Delta_r E_{tot}$	$\Delta_r H^0(298)$	$\Delta_r G^0(298)$
$SiF_4 + 1/2\ H_2O = 1/2\ SiF_3\text{-}O\text{-}SiF_3 + HF$	38.9 (31.4)[a]	37.6 (30.1)[a]	32.6 (25.1)[a]
$SiF_4 + H_2O = SiF_3OH + HF$	35.4 (33.6)[a]	33.5 (31.7)[a]	27.0 (26.3)[a]
$SiF_4 + 2/3\ H_2O = 1/3\ SiF_3(OSiF_2)_2F + 4/3\ HF$	52.0	50.3	46.4
$SiF_4 + H_2O = 1/6\ Si_6F_{12}O_6 + 2\ HF$	(51.7)[b]		
$SiF_4 + H_2O = 1/5\ Si_5F_{10}O_5 + 2\ HF$	(52.3)[b]	(48.7)[b]	(42.4)[b]
$SiF_4 + H_2O = 1/4\ Si_4F_8O_4 + 2\ HF$	82.1	75.8	74.2
$SiF_4 + 2\ H_2O = SiF_2(OH)_2 + 2\ HF$	74.7	71.3	67.7
$SiF_4 + H_2O = 1/3\ Si_3F_6O_3 + 2\ HF$	86.7	82.4	73.2
$SiF_4 + H_2O = 1/2\ Si_2F_4O_2 + 2\ HF$	157.0	151.4	134.1
$SiF_4 + H_2O = SiF_2O + 2\ HF$	410.4	400.6 (382.1)[c]	355.3 (337.4)[c]

Графики :

Partial pressure (P) vs time



$1/(P_\infty - P)$ vs time



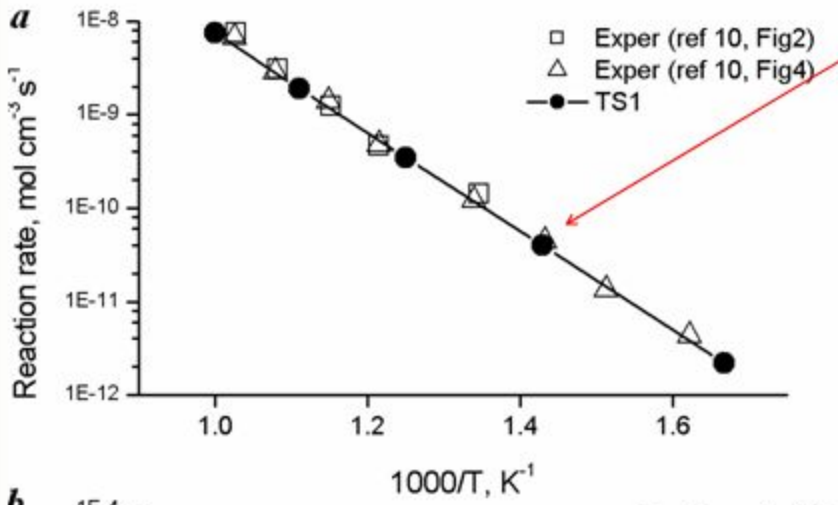
$$SiF_4 + H_2O \rightarrow SiF_3OH + HF$$

$$2\ SiF_3OH \rightarrow F_3Si{-}O{-}SiF_3 + H_2O$$

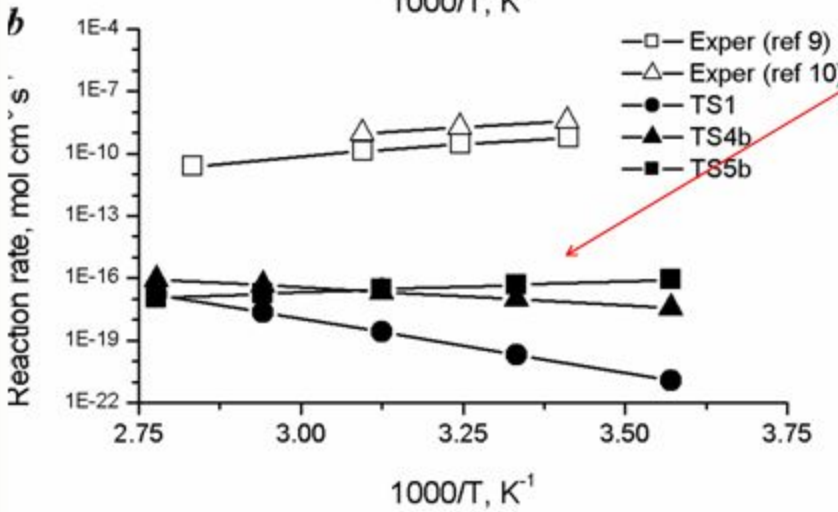
Second-order kinetics on reagents

Графики должны быть «говорящими»:

Рассчитанные константы скорости би-, три- и тетрамолекулярного гидролиза $SiCl_4$ в высоко- и низкотемпературной области

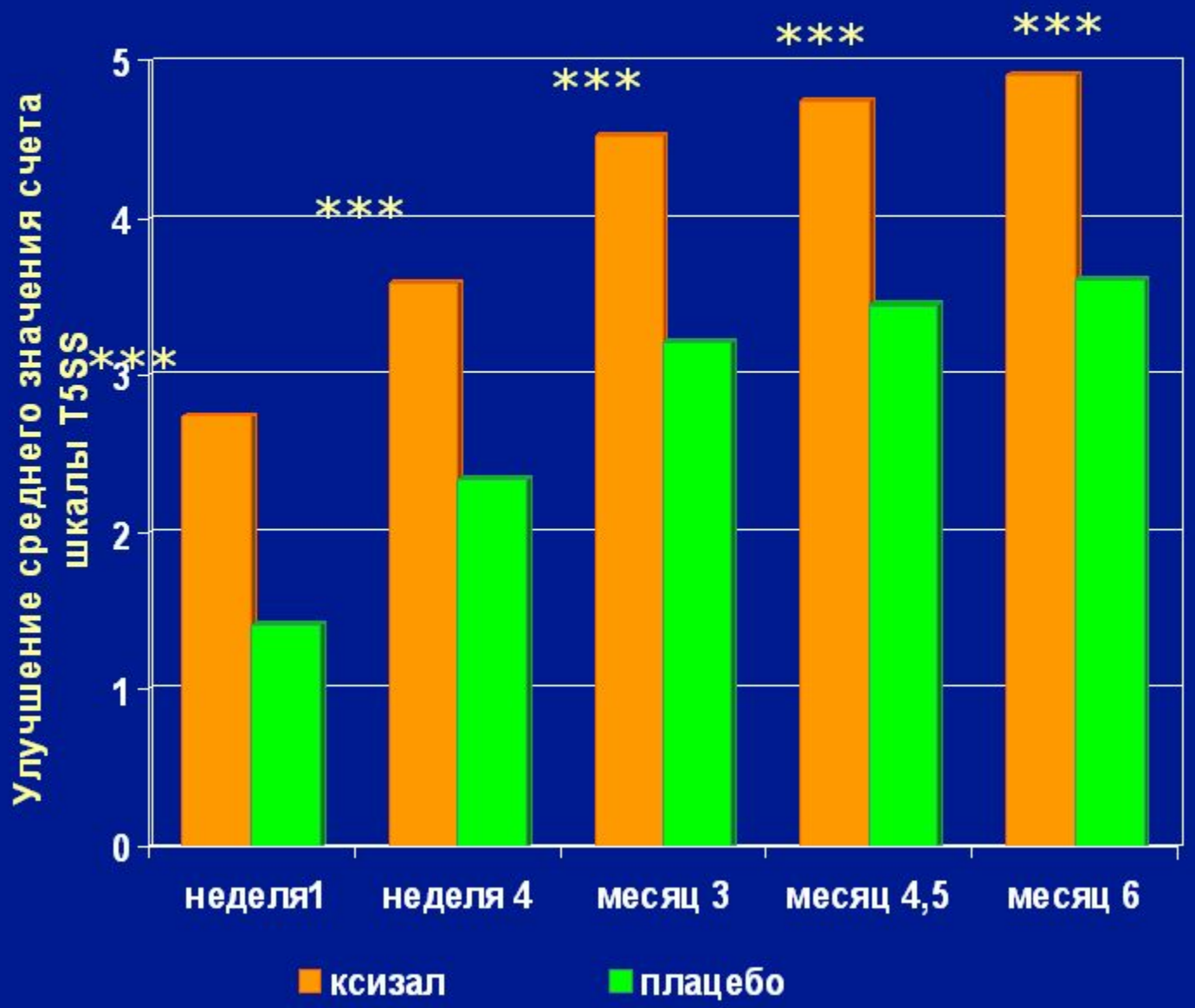


В высокотемпературной области рассчитанная константа скорости хорошо совпадает с экспериментальными значениями.



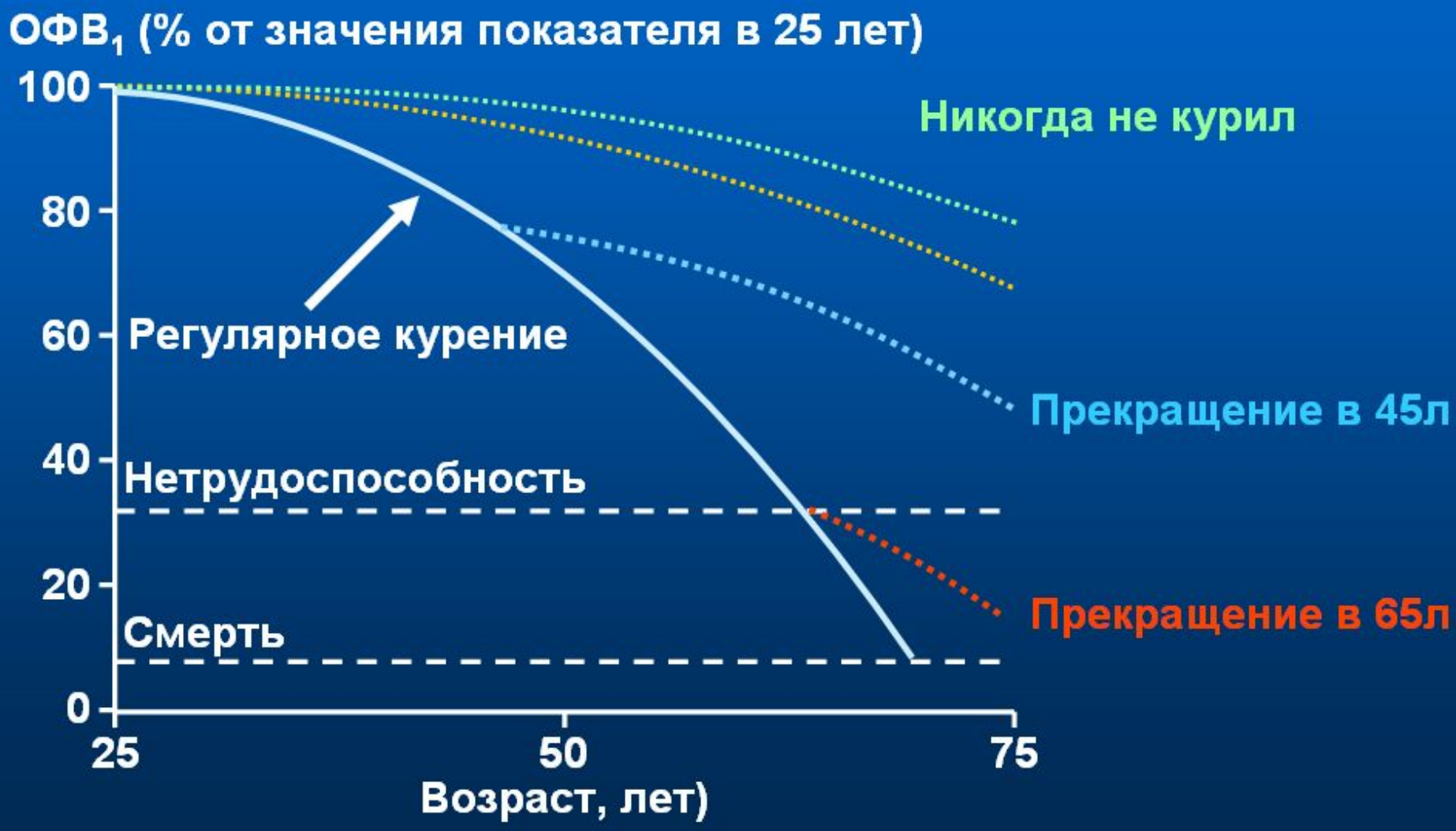
В низкотемпературной области рассчитанная константа скорости отличается от экспериментальных значений на 6-8 порядков.

Показатели улучшения симптомов ринита



*** p < 0.00

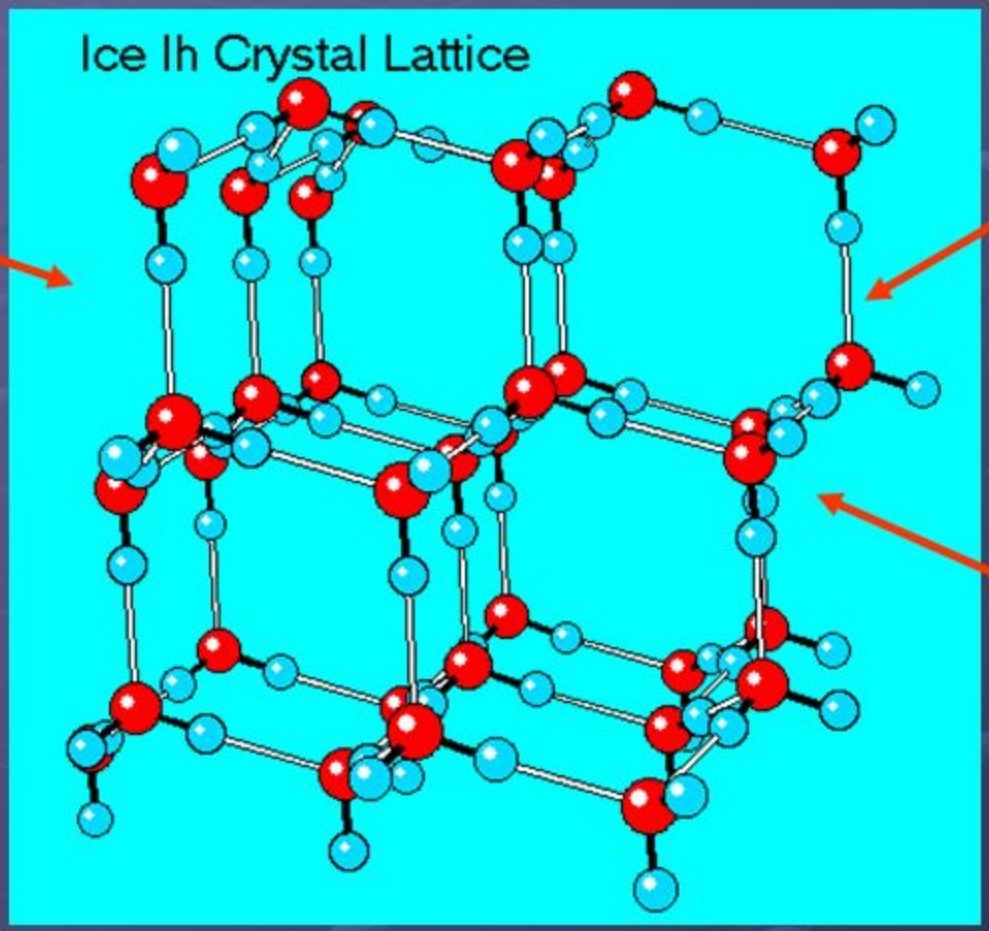
Влияние курения и отказа от него на функциональное состояние легких



Рисунки: они тоже должны «говорить»!

Structure of hexagonal phase of water ice (ice *Ih*)

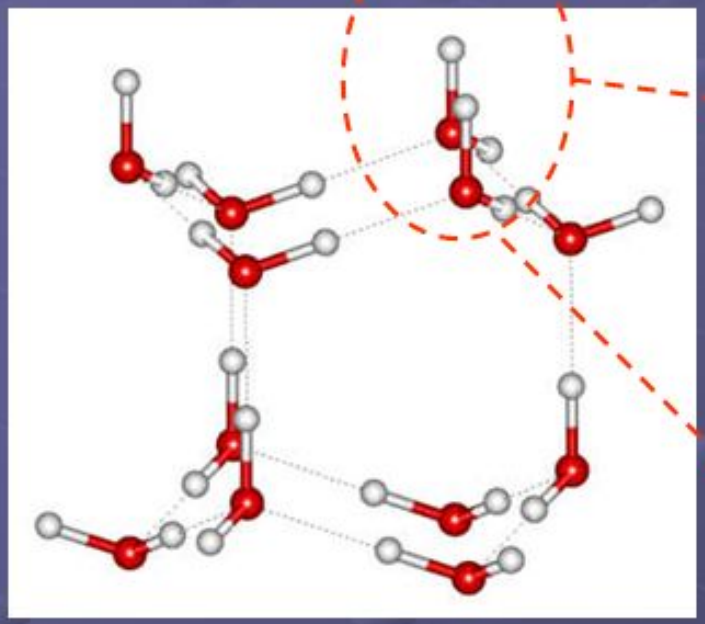
Diamond-like structure with water molecules at the nodes

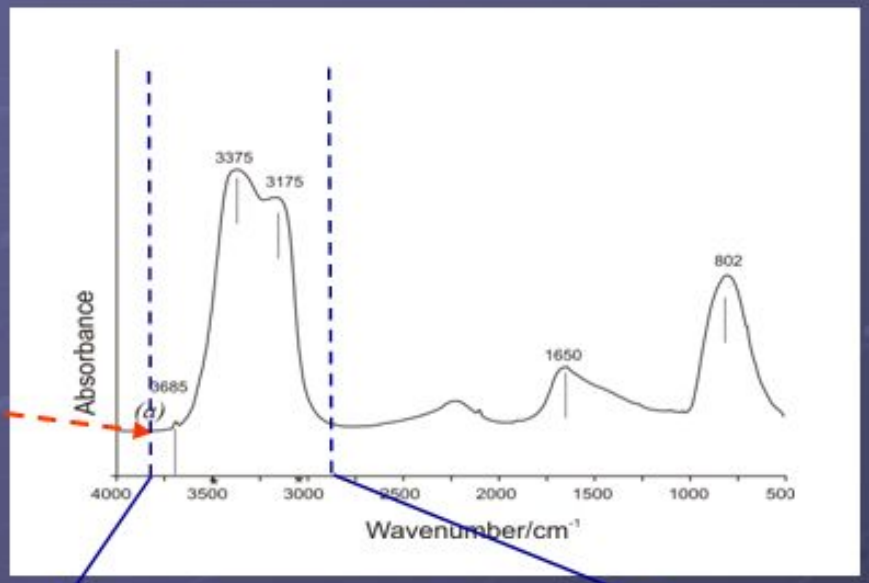


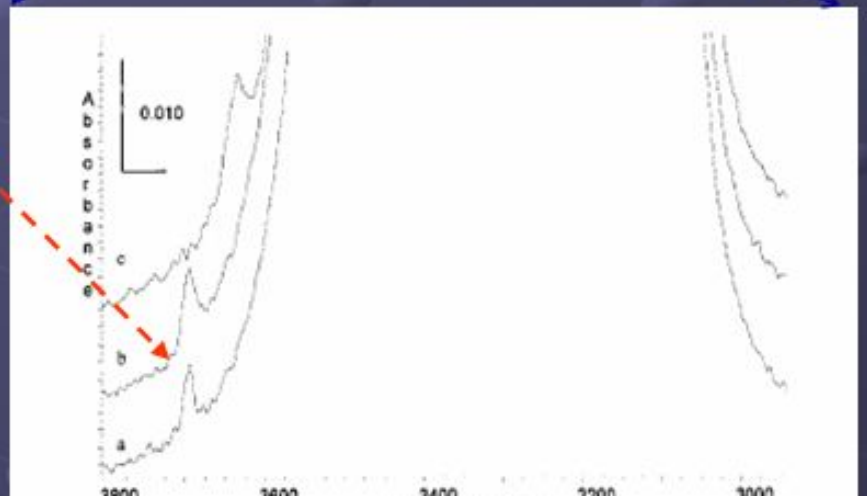
H-bonds connecting O and H atoms

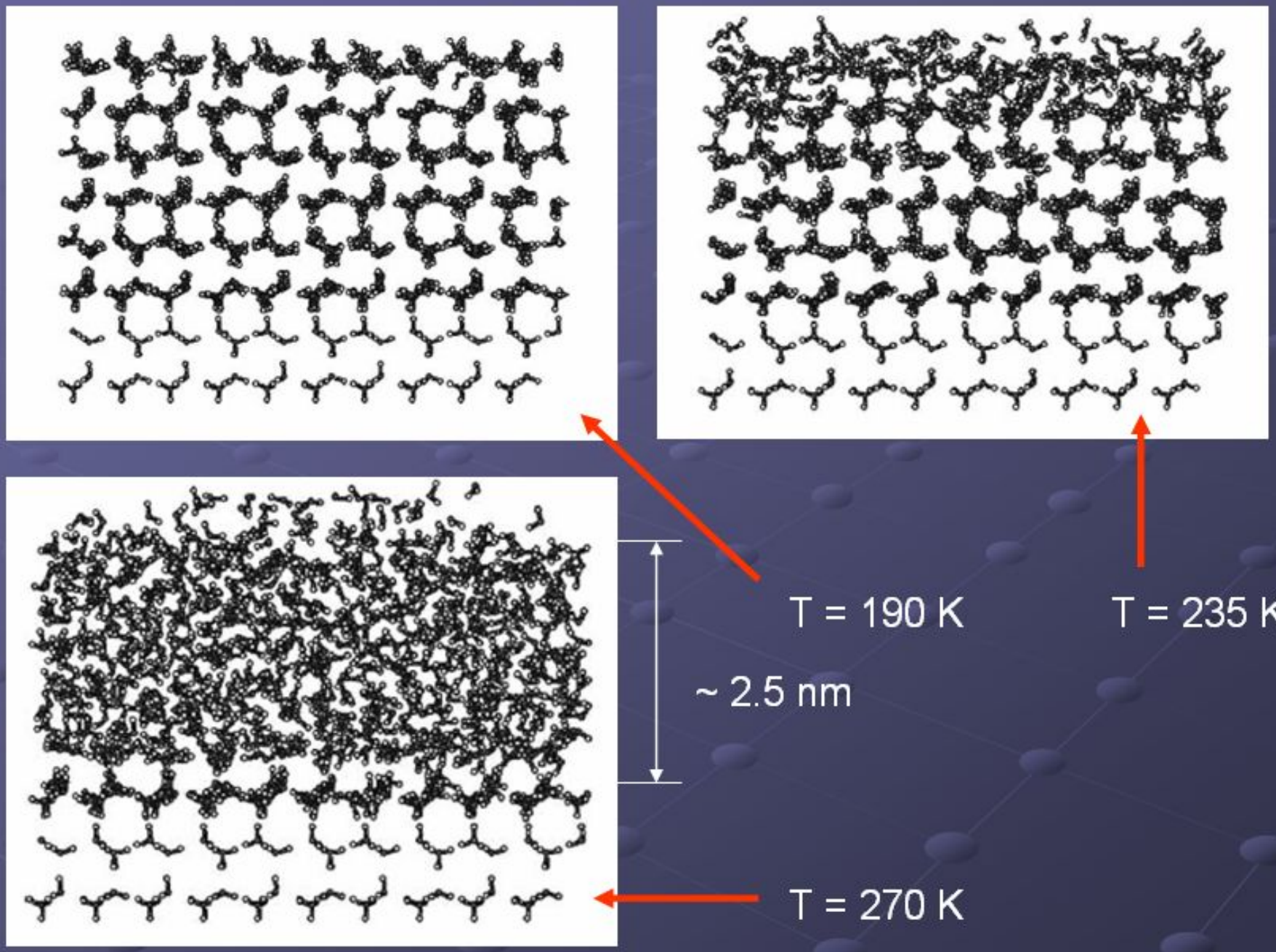
H2O molecules stochastically oriented („ice rules“)

Dangling OH groups (tH) on the ice surface – evidences from IR spectra








T = 190 K
T = 235 K
~ 2.5 nm
T = 270 K

Клинические варианты

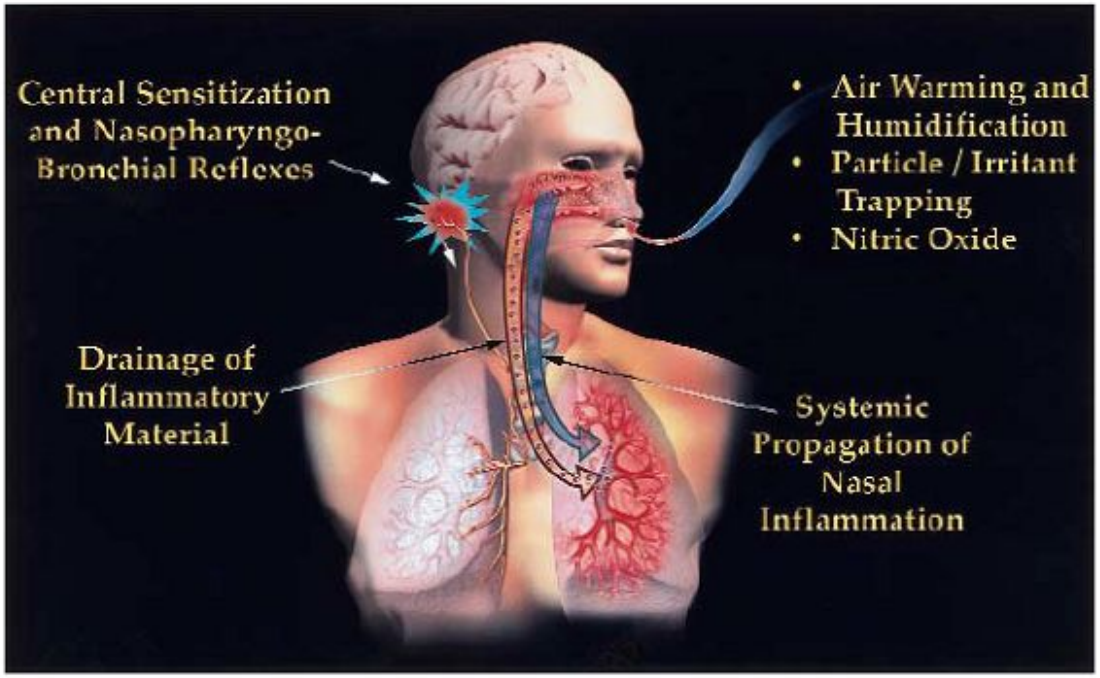


FIG 4. Mechanisms through which the nasal airways might interact with the lower airways.

«Изолированный АР» - у части пациентов. Чаще – сочетанная патология:

- **АР + полипоз**
- **Аллергический риносинусит (АР = АРС)**
- **АР + средний отит (евстахеит)**
- **АР + аденоидит**
- **АР + бронхиальная астма**

Фотографии экспериментальных установок

Измерение бронхиальной концентрации оксида азота

Определение H_2O_2 в конденсате выдыхаемого воздуха (Нижний Новгород, ДГКБ №1)

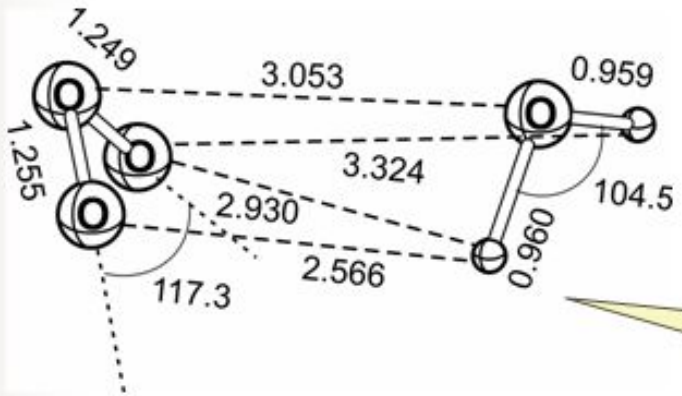
Объект исследования:
Здоровые дети в возрасте от 6 до 12 лет – 5 человек
Дети с атопической БА в возрасте от 7 до 16 лет – 28 пациентов

Методы исследования:
Сбор конденсата – R-tube
Определение содержания H2O2 в конденсате выдыхаемого воздуха – анализатор на основе биосенсора

Further optimization started from the DPES structures: two local minima of the $H_2O{\cdot}O_3$ complex

Full optimization at QCISD/aug-cc-pVTZ

Two stable conformations:.

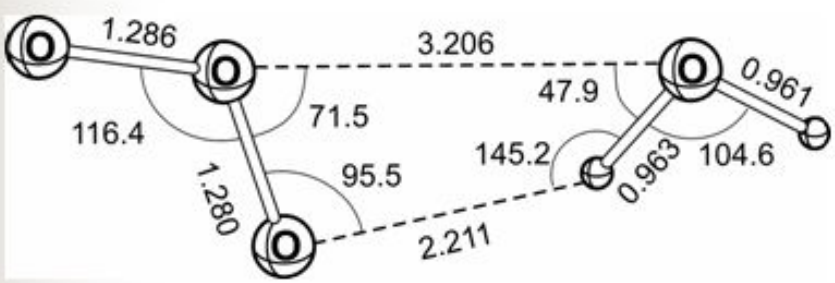


Most favorable "twisted" C_1

Global minimum on the PES, true LM

D_e=9.4 kJ/mol, D_0 =5.3 kJ/mol (extrapolated)

(1) Medium between „doppel-decker" and „dipole-dipole" conformations
(2) Explains differences between *ab initio* and experimental (MWS) geometries



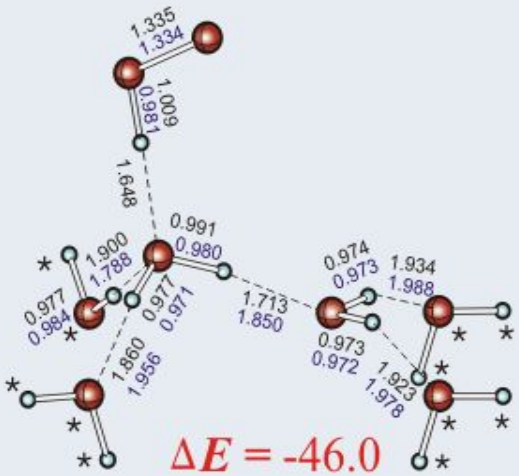
Another stable conformation: planar *cis-trans* C_s

True local minimum on the PES

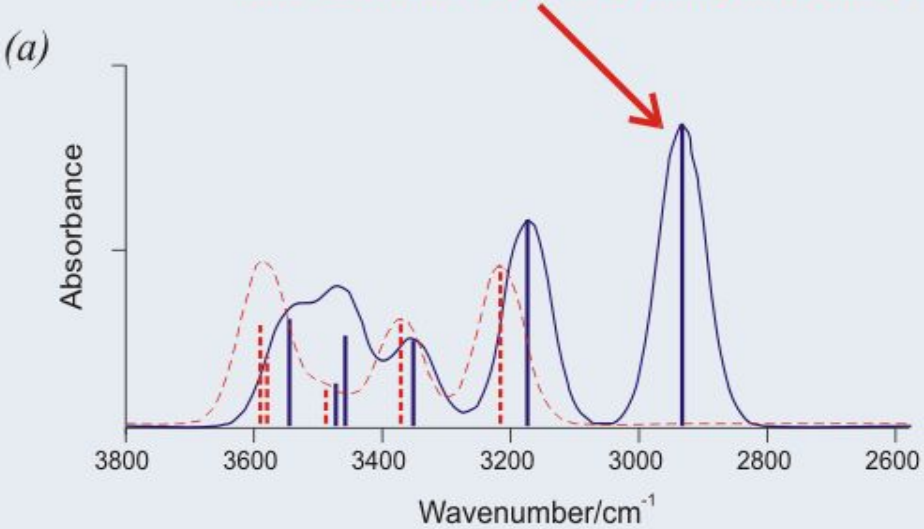
D_e=9.3 kJ/mol, D_e+BSSE =7.3 kJ/mol

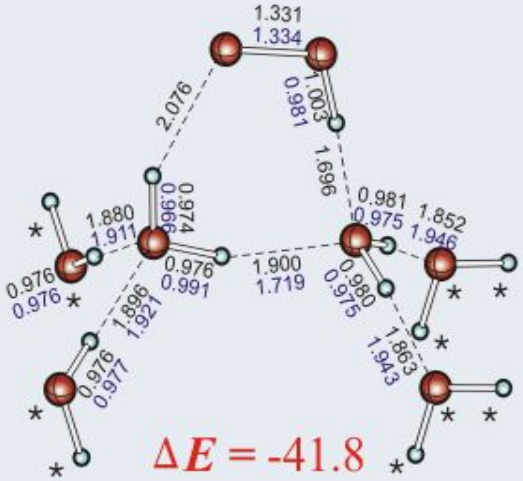
Рисунки - сравнение с экспериментом:

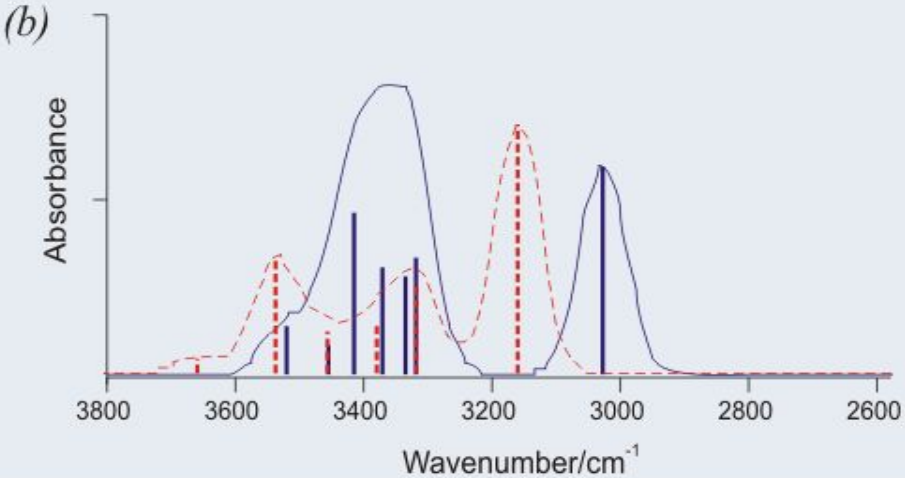
Coordination modes and IR spectra of OOH radical on the ice surface



This band is located near to the position ofthe experimental band 2860 cm-1 appearing during the ozone photolysis

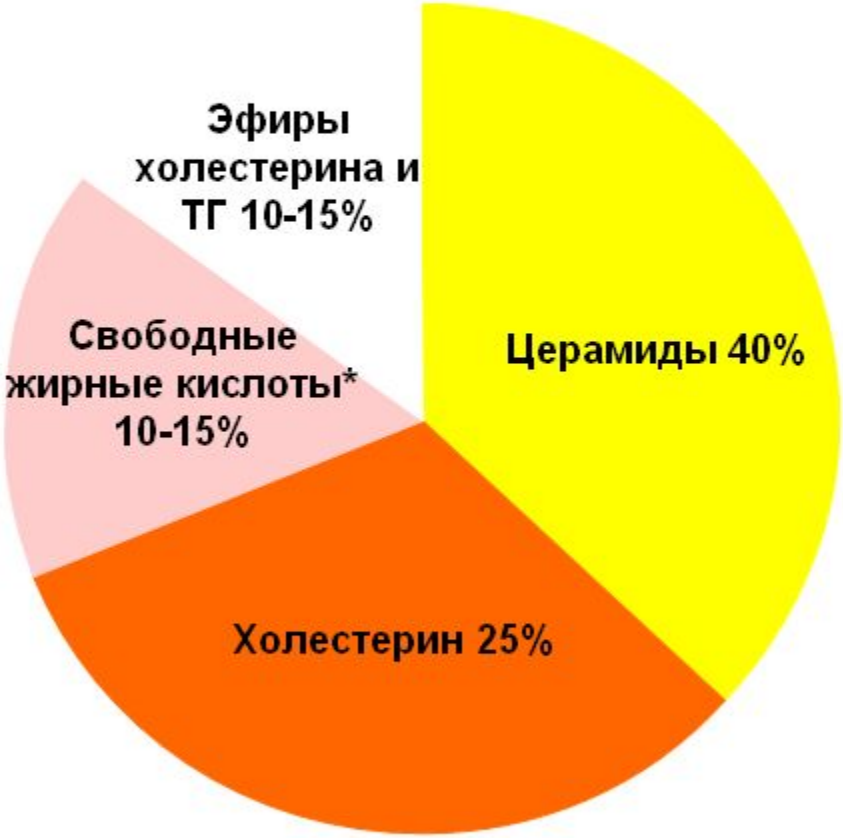






СТРУКТУРА И ФУНКЦИИ ЛИПИДОВ РОГОВОГО СЛОЯ ЭПИДЕРМИСА

- **Соотношение липидов в здоровой коже:**



- **Функции липидов рогового слоя:**

Предотвращают избыточную потерю воды

Поддерживают определенную степень гидратации эпидермиса, обеспечивая его функциональные свойства и здоровый внешний вид

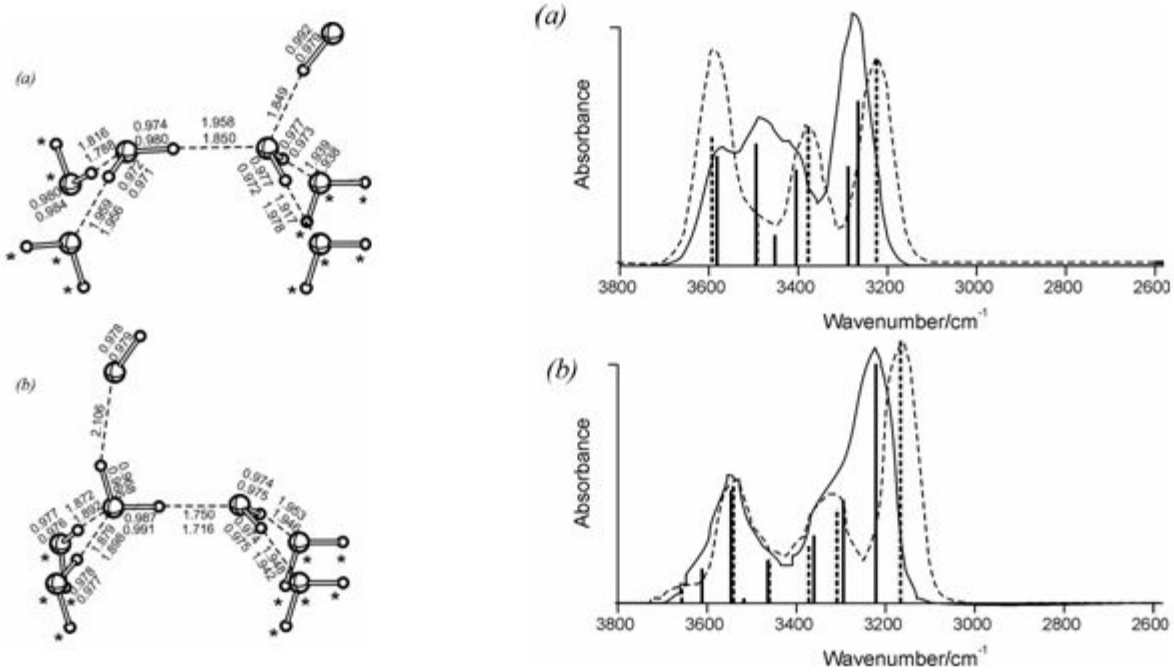
Предупреждают проникновение через кожу водорастворимых веществ

Cork *J Allergy Clin Immunol* 2006
Norlen *J Invest Dermatol* 1999

пальмитиновая стеариновая, олеиновая линоленовая кислоты

Совмещение рисунков, графиков и таблиц:

Взаимодействие HO с кластером льда



Комплекс	ΔE_{tot} [a]	ΔE_{tot}+BSSE [a]	ΔE_{tot}+BSSE+ZPE [a]
HO….O(лед)	**-30.1**	**-28.0**	**-17.6**
OH….H-O(лед)	**-7.5**	**-6.7**	**-0.4**

[a] расчет B3LYP/6-311++G(2d,2p)//B3LYP/6-31++G(d,p)

Схема, объясняющая возникновение наблюдаемых особенностей при адсорбции SO_2 и H_2O_2 на льду

$SO_2(g) \leftrightarrows SO_2(ads)$ $\quad K_1 = [SO_2]_{ads}/P(SO_2)$ (1)

$SO_2(ads) + H_2O(ice) \leftrightarrows H^+(ice) + HSO_3^-(ice)$ $\quad K_2' = [H^+]_{ice}\,[HSO_3^-]_{ice}/[SO_2]_{ads}$ (2)

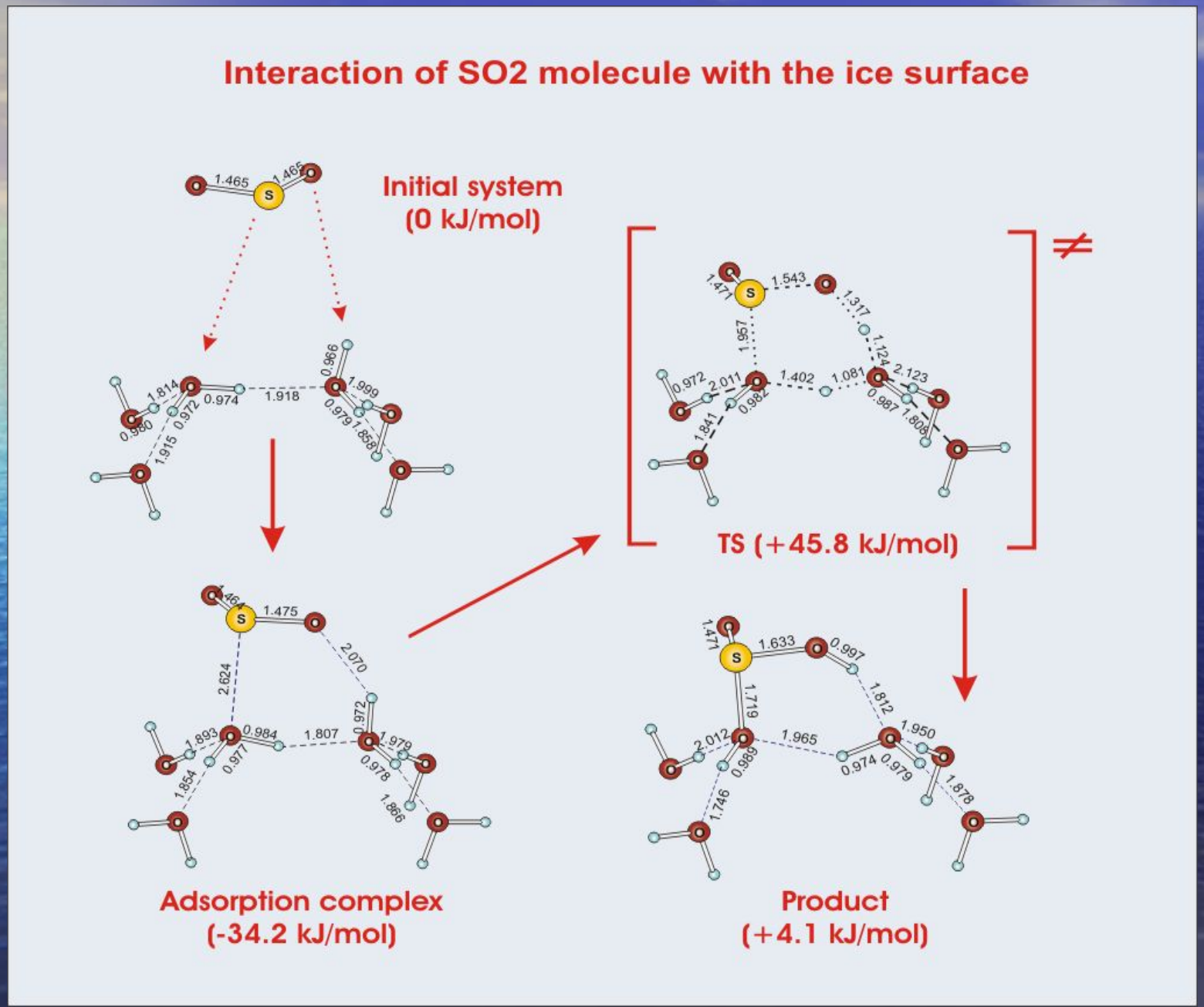
Полагая $[H^+]_{ice}=[HSO_3^-]_{ice}$ и $[SO_2]_{tot} = [HSO_3^-]_{ice} + [SO_2]_{ads}$,

уравнения (1)-(2) могут быть решены. Это приводит к выражению:

$$[SO_2]_{tot} = K_1 \cdot P(SO_2) + [K_1 K_2' \cdot P(SO_2)]^{1/2}$$

Если $K_2' >> K_1$ до величина поглощения: $[SO_2]_{tot} \sim P(SO_2)^{1/2}$

Формулы и уравнения:



Обсуждение

Как правило, все сообщаемые сведения должны быть обсуждены!

- Сравнение с подходами других исследователей
- Согласие теории с экспериментом или эксперимента с известными теориями?
- Что нового дает новый подход?
- Какие возможности предоставляют полученные результаты?
- Частные случаи? («красота – это частные случаи»!)

«Красота и изящество» работы

– возможность объяснения разнородных, казалось бы, не связанных между собой явлений на основе общей «теории», «формулы», которая компактно представляет эти явления как частные случаи общего механизма.

Выводы

- Отдельный слайд нужен не всегда!
- Если делается слайд – он не должен быть «слепым»!
- Лучше меньше, но более общие
- «Проговариваривание» не должно повторять текст (в отличие от доклада на «защите»)
- Положительную роль играет добавление графических «опорных рисунков», напоминающих основные результаты

Завершение доклада

Важно не только психологически, но и с точки зрения закрепления необходимой информации – кто Вы, откуда, с кем работаете !

- Благодарности (в т.ч. грантовые)
- Состав команды (портреты?, фото лаборатории, коллектива?)
- Адреса (фото института, города, местности?)
- Контакты по e-mail и т.д.

Особенно важно для «инвестиционной» презентации!

Ответы на вопросы

- Оставить часть второстепенного материала на вопросы (намеренно!)
- «Отвечать в любом случае!»
- «Мое слово – последнее!» (за эту работу отвечаю я, а не мой начальник)
- Количество вопросов – качество доклада!

Этика

- Регламент
- Число слайдов
- Нумерация слайдов
- Обращения к ведущему, ассистенту, аудитории
- Шутки во время выступления (лучше «недоборщить», чем переборщить)
- Ответы на вопросы
- Опоздания и возможные изменения программы
- Задавая вопрос, надо «интересоваться» (не язвить, даже если вопрос подразумевает критику!)
- Отвечая на вопрос, надо <u>доброжелательно</u> «пояснять» сказанное в докладе

Учет психологии

- Громкость и внятность (Как минимум, начало и выводы должны быть произнесены громко, четко, уверенно)
- «Запоминается первое и последнее»
- Говорить свободно! (не должно создаваться впечатление заученности!)
- Подготовка – накануне (как минимум за 1 ночь!)
- При подготовке - проговаривание всего доклада, сначала в свободном темпе, затем с хронометрированием.
- Говорить надо так, как если бы Вы объясняли это человеку, который ничего не знает об этой работе, но интересуется ей!

Презентация

- Техническое воплощение
  - Программа PowerPoint (достоинства и недостатки)
  - MS Word (?)
  - Графические редакторы (CorelDraw)
  - Научная графика (Origin, MathType, Mathematica)
  - Грабберы (CorelCapture)

Наиболее удачные результаты получаются при разумном сочетании нескольких программ!

Стендовый доклад (постер)

- Заголовок
  - Конференция
  - Название
  - Авторы
  - Организация
  - Эмблема

XIth International Congress of Quantum Chemistry 2003, July 20-26, University of Bonn, Germany

Multimolecular reaction mechanism of the gas-phase hydrolysis of $SiCl_4$

S.K. Ignatov[1,2], P.G. Sennikov[2,3], A.G. Razuvaev[1], O. Schrems[2]

[1] *University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia*
[2] *Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research, Bremerhaven, Germany*
[3] *Institute of Chemistry of High-Purity Substances Russian Academy of Sciences, Nizhny Novgorod, Russia*

Introduction

The commonly accepted mechanism for the hydrolysis of $SiCl_4$ at low $H_2O/SiCl_4$ ratios can be represented by the scheme 1, reactions (1)-(3).

The development of new experimental techniques in the past two decades has allowed direct kinetic measurements of the gas-phase hydrolysis process.[1] It was found that *(a)* the order of the reaction with respect to H_2O is 2, not 1 (as suggested by the scheme (1)-(3)); *(b)* silicon tetrachloride hydrolysis takes place even at 20°C; and *(c)* the reaction rate shows the temperature maximum at 30-40°C.

The recent study[1] confirmed that the low-temperature hydrolysis does take place in the range 20-100°C and that the reaction orders are 1 and 2 for $SiCl_4$ and H_2O, correspondingly. Also, the reaction rate decreases with increasing temperature up to 100°C, corresponding to a negative energy of activation, and goes practically to zero at 100°C. However, at 470°C, the hydrolysis begins again and is a first order reaction for both $SiCl_4$ and H_2O. In range 470-800°C, $SiCl_4$ hydrolysis is a regular bimolecular reaction with a positive activation energy of 121.9 kJ/mol.[1]

On the basis of above observations we conclude that the reaction mechanism for the hydrolysis of $SiCl_4$ given by equations (1)-(3) cannot be considered as absolutely correct or, at least, complete.

Since the 1990's, there have been a number of theoretical studies of the mechanism of siloxane formation.[2-5] It was concluded that one of the probable explanations for the fast gas-phase hydrolysis reaction at low temperature is the coordination of additional water molecules to the transition structures. However, no rate constants were calculated and no direct comparison with experiment was made. Although such reactions are clearly feasible in aqueous solution, the applicability of this mechanism to the gas phase had to be proved. This was one of the goals of the present work.

Scheme 1

Bimolecular mechanism of $SiCl_4$ hydrolysis under low $H_2O/SiCl_4$ ratios:
(commonly accepted scheme):

$SiCl_4 + H_2O \rightarrow [TS1] \rightarrow SiCl_3OH + HCl$ (1) *(primary hydrolysis)*
$Cl_3SiOH + HOSiCl_3 \rightarrow Cl_3Si\text{-}O\text{-}SiCl_3 + H_2O$ (2a) *(condensation)*
$Cl_3SiOH + SiCl_4 \rightarrow Cl_3Si\text{-}O\text{-}SiCl_3 + HCl$ (2b) *(condensation)*
$Cl_3Si\text{-}O\text{-}SiCl_3 + H_2O \rightarrow Cl_3Si\text{-}O\text{-}SiCl_2\text{-}OH + H_2O$ (3) *(further hydrolysis, branching, cyclization...)*

Multimolecular mechanism of primary hydrolysis
(proposed to explain anomalous kinetic features observed at low temperatures):

$SiCl_4 + 2H_2O \rightarrow [TS4] \rightarrow SiCl_3OH + H_2O + HCl$ (4) *(Additional water molecules*
$SiCl_4 + 3H_2O \rightarrow [TS5] \rightarrow SiCl_3OH + 2H_2O + HCl$ (5) *are coordinated to TS)*

Table 1

The B3LYP/6-311++G(2d,2p) and G2(MP2)//B3LYP/6-311++G(2d,2p) (in square brackets) calculated energies and thermodynamic parameters of transition states for the $SiCl_4$ hydrolysis reactions (1), (4), and (5).

Geometry of transition state	ν [*] cm^{-1}	E [*] a.u.	ΔE [**] kJ/mol	$\Delta(E+ZPE)$ [**] kJ/mol	ΔH [**] kJ/mol	ΔG [**] kJ/mol
Reaction $SiCl_4 + H_2O \rightarrow SiCl_3OH + HCl$						
TS1a, Fig.1*a*	302*i*	-2207.0524212	105.0 [103.4]	107.0 [105.4]	101.1 [99.4]	142.5 [140.9]
Reaction $SiCl_4 + 2H_2O \rightarrow SiCl_3OH + HCl + H_2O$						
TS4a (open) Fig.2*a*	256*i*	-2283.5349230	44.5	57.7	49.7	127.7
TS4b (cyclic) Fig.2*b*	226*i*	-2283.5407040	34.4 [30.3]	49.9 [43.1]	39.1 [32.8]	121.3 [114.9]
Reaction $SiCl_4 + 3H_2O \rightarrow SiCl_3OH + HCl + 2H_2O$						
TS5a (open) Fig.3*a*	253*i*	-2360.0193902	−7.1 [**]	13.4	1.2	122.3
TS5b (closed), Fig.3*b*	108*i*	-2360.0241989	−25.0 [**] [−35.3] [**]	0.5 [−9.8] [**]	−11.9 [**] [−22.2]	111.5 [101.2]

[*] – imaginary frequency, cm^{-1}; [**] – activation energy; [**] – activation energy including the ZPE.
[**] – the negative E-values are calculated relatively to the isolated (uncoordinated) reactants

TS1 Fig.1

TS4 Fig.2

TS5 Fig.3

Fig.4

Постер

- Текст (не должен быть перегруженным!)
  - Краткая формулировка проблемы
  - Краткая формулировка идеи
  - Цель – выписана четко и конкретно
  - Методы – отдельная секция
  - Результаты – можно без текста, только рисунки графики, фото с краткими пояснениями
  - Обсуждение может отсутствовать
  - Выводы – выписаны полностью
  - Библиография (если требуется)
  - Благодарности

Постер

- Иллюстрации
  - Основные результаты должны быть даны в виде таблиц, графиков и рисунков (фотографий)
  - Иллюстрации должны говорить за себя
  - Пояснения должны быть краткими
- Изготовление
  - Программы PowerPoint, CorelDraw
  - Стандартный размер А0
  - Удобно изготовить в виде одного документа и распечатать на принтере А0

Постер

- Действия докладчика
  - Дежурство у постера (обязательно! – это характеризует ваш профессионализм!)
  - Пояснения интересующимся
  - Print-outs (раздаточный материал) – копии постера в формате А3, А4 (10-15 шт.)
  - Копии статей, публикаций
  - Визитные карточки

Домашнее задание

- Подготовить сообщение о своей работе в формате: 5 мин. доклад + 5 мин. ответы на вопросы
  - Использовать PowerPoint
  - Доклад должен содержать описание проблемы, замысла, цели, методов, полученных результатов и их сравнение с предшествующими исследованиями
  - Доклад должен быть иллюстрирован

Благодарности:

- Нижегородский научно-инновационный центр (приглашение)
- Российский Фонд фундаментальных исследований (фин. поддержка)
- Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского (техническое обеспечение)

Контактный адрес

- Игнатов Станислав Константинович, ignatov@ichem.unn.ru

Спасибо за внимание!