

О руководителе научного содержания программы магистратуры

Код и наименование основной образовательной программы (ООП): **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль) ООП: **Физика наноразмерных систем**

Руководитель ООП: **Орлов Юрий Димитриевич, д-р. хим. наук, профессор, заведующий кафедрой общей физики**

Тематика научно-исследовательской деятельности

1. Проект № 1266 «Изучение структурных, электронных, энергетических, спектроскопических и термодинамических свойств полифункциональных органических соединений». Государственное задание в рамках базовой части 2016.
2. Изучение структурных, электронных, энергетических спектроскопических и термодинамических свойств полифункциональных органических соединений. Утверждено решением ученого совета, протокол №11 от 03.07.2017.
3. Изучение структурных, электронных, энергетических спектроскопических и термодинамических свойств полифункциональных органических соединений. Утверждено решением ученого совета, протокол №2 от 30.08.2017.
4. Проект № 4.6469.2017/БЧ «Развитие методов расчетного прогнозирования электронных, структурных, энергетических, спектральных и термодинамических характеристик индивидуальных соединений на основе методов квантовой механики». Государственное задание в рамках базовой части 2017.

Публикации в ведущих отечественных рецензируемых научных журналах и изданиях

1. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Термодинамические параметры разложения GeO в интервале 298-1500 К // Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов. Труды XIII Международной конференции. Часть 2. Курск: Юго-Западный государственный университет, 2016. С.14-18.
2. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Применимость функционалов в базисе слетеровых функций к расчету свойств молекул // Структура и динамика молекулярных систем. Сборник статей XXIII Всероссийской конференции. Москва: ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, 2016. С.192-194.
3. Белов А.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Особенности вычисления функций Матье произвольных порядков // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Прикладная математика. 2016. №4. С.45-59.
4. Туровцев В.В., Емельяненко В.Н., Орлов Ю.Д. Термодинамические функции лактонов в газообразном состоянии // Известия Академии наук. Серия химическая. 2016. №1. С.82-90.
5. Туровцев В.В., Чернова Е.М., Ситников В.Н., Емельяненко В.Н., Орлов Ю.Д. Изучение электронного строения и свойств пропаргильного радикала // Журнал структурной химии. 2016. Т.57. №3. С.453-460.
6. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Изучение внутреннего вращения в 1-монофторалкилах // Вестник Казанского технологического университета. 2016. №18. С.5-8.
7. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1-фторгексане. Структурная функция // Современные тенденции развития науки и технологий. 2016. №4-1. С.25-27.
8. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Структурная функция внутреннего вращения в радикале фтор пентана CH₃-(CH₂)₃-C•HF // Современные тенденции развития науки и технологий. 2016. №5-2. С.18-20.
9. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Применимость функционалов в базисе слетеровых функций к расчету свойств молекул // Структура и динамика молекулярных систем. Сборник статей XXIII Всероссийской конференции, 14-й Школы молодых

- ученых «Спектроскопия молекулярных систем». М.: ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, 2016. С.192-194.
10. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Структурная функция внутреннего вращения в радикале фторпропана $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C}\bullet\text{HF}$ // Новейшие достижения в науке и образовании. Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции. Смоленск: ООО Новаленсо, 2016. С.161-162.
 11. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1-фторбутане. Структурная функция // Актуальные вопросы перспективных научных исследований. Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции. Смоленск: ООО Новаленсо, 2016. С.156-158.
 12. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1,5 – дифторпентане // Теория и практика приоритетных научных исследований. Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции: в 4-х ч. Часть 1. Смоленск: ООО Новаленсо, 2016. С.135-137.
 13. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Сравнение электронного строения и электроотрицательностей 1-,2- и 3- фторзамещенных алканов // Современные тенденции в науке, технике, образовании. Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции: в 3-х ч. Часть 1. Смоленск: ООО Новаленсо, 2016. С.132-133.
 14. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Структурная функция внутреннего вращения в радикале фторбутана $\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_2\text{-C}\bullet\text{HF}$ // Инновационные направления в науке, технике, образовании. Сборник научных трудов по материалам Международной научно-практической конференции: в 2-х ч.. Смоленск: ООО Новаленсо, 2016. С.102-104.
 15. Белов А.Н., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Использование базиса функции Матъе для численного решения двумерного торсионного уравнения Шредингера // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. Тверь: Тверской государственный университет, 2016. С.48.
 16. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1,N – дифторалканах // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. Тверь: Тверской государственный университет, 2016. С.139-140.
 17. Туровцев В.В., Емельяненко В.Н., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Термодинамические характеристики реакции разложения GeO в интервале 298-1500 К // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. Тверь: Тверской государственный университет, 2016. С.273-274.
 18. Туровцев В.В., Емельяненко В.Н., Орлов Ю.Д. Термодинамические функции метилбензохинона в состоянии идеального газа // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. Тверь: Тверской государственный университет, 2016. С.275-276.
 19. Чернова Е.М., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Создание электронной базы данных энтальпий образования углеводородных радикалов // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика»: Сборник научных трудов. Тверь: Тверской государственный университет, 2016. С.305.
 20. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Электронные параметры монофторалканов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2016. №4. С.88-94.

Апробация результатов научно-исследовательской деятельности на национальных и международных конференциях

1. Белов А.Н., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Использование базиса функции Матье для численного решения двумерного торсионного уравнения Шредингера // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь. 2016.
2. Kotomkin A., Rusakova N., Turovtsev V., Orlov Yu. Internal rotation in the 1,6 – difluorinehexane // International School-Seminar on Computer-Aided Molecular Design. Kazan, 2016.
3. Белов А.Н., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Решение двумерного торсионного уравнения Шредингера в базисе функций Матье // XXVIII Симпозиум «Современная химическая физика». Шепси. 2016.
4. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1,1,1,- трифторалканов // XXXIV Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике. Моск.обл. 2016.
5. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Термодинамические параметры реакций разложения GeO // XXXIV Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике. Моск.обл. 2016.
6. Чернова Е.М., Ситников В.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Электронное строение кислородсодержащих сопряженных радикалов // XXXIV Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике. Моск.обл. 2016.
7. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Применимость методов DFT к расчету спектров оксидов германия // XXV Съезд по спектроскопии. Троицк. 2016.
8. Чернова Е.М., Русакова Н.П., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Развитие метода макроинкрементирования в физической химии // X Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование». Саратов. 2016.
9. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1,N – дифторалканах // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь. 2016.
10. Русакова Н.П., Чернова Е.М., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в метилидинсульфоксидпропане // XXXIV Всероссийский симпозиум молодых ученых по химической кинетике. Моск.обл. 2016.
11. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Сравнительная характеристика внутреннего вращения в молекулах монофторалканов и их радикалах // X Всероссийская молодежная научно-инновационная школа «Математика и математическое моделирование». Саратов. 2016.
12. Туровцев В.В., Емельяненко В.Н., Орлов Ю.Д. Термодинамические функции метилбензохинона в состоянии идеального газа // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь, 2016.
13. Туровцев В.В., Емельяненко В.Н., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Термодинамические характеристики реакции разложения GeO в интервале 298-1500 К // VI Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь, 2016.
14. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Решение торсионного уравнения Шредингера с периодическим потенциалом общего вида. Амплитуда вероятности и плотность вероятности // XXV Съезд по спектроскопии. Троицк. 2016.
15. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1,5 – дифторпентане // 6. Международная научно-практическая конференция «Теория и практика приоритетных научных исследований». Смоленск. 2016.
16. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Термодинамические параметры разложения GeO в интервале 298-1500 К // XIII Международная Конференция «Перспективные технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов». Курск. 2016.
17. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Структурная функция внутреннего вращения в радикале фторбутана $\text{CH}_3\text{-(CH}_2\text{)}_2\text{-C}\bullet\text{HF}$ // Международная

- научно-практическая конференция «Инновационные направления в науке, технике, образовании». Смоленск. 2016.
18. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1-фторбутане. Структурная функция // Международная научно-практическая конференция «Актуальные вопросы перспективных научных исследований». Смоленск. 2016.
 19. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Применимость функционалов в базисе слетеровых функций к расчету свойств молекул // XXIII Всероссийская конференция «Структура и динамика молекулярных систем». Йошкар-Ола. 2016.
 20. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Каплунов И.А. Сравнение стандартных функционалов расчета свойств молекул на вариационном пределе // XVIII Симпозиум по межмолекулярному взаимодействию и конформациями молекул. Ярославль. 2016.
 21. Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Поиск оптимальной квантово-химической модели расчета свойств молекул // XXIII Российский национальный конгресс «Человек и лекарство». Москва. 2016.
 22. Чернова Е.М., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Создание электронной базы данных энтальпий образования углеводородных радикалов // Шестая Международная научная конференция «Химическая термодинамика и кинетика». Тверь. 2016.
 23. Котомкин А.В., Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Внутреннее вращение в 1-фторпентане. Структурная функция // Вторая международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Химические проблемы современности». Донецк. 2016.
 24. Каплунов И.А., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Оценка погрешностей квантовохимических методов расчета структур // Первый Российский кристаллографический конгресс. Москва. 2016.