

**Отчет о выполнении требований по достижению значений показателей результативности научно-исследовательской работы №3.1235.2014/Кв  
рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности за 2015 год**

## Показатели проекта на год

<b>Показатель</b>	<b>Единица измерения</b>	<b>Плановое значение</b>	<b>Фактическое значение</b>
Количество диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, защищенных исполнителями проекта	ед.	1	1
Количество диссертаций на соискание ученой степени доктора наук, защищенных исполнителями проекта	ед.	0	0
Количество статей в научных журналах, индексируемых в базе данных Web of Science	ед.	9	12
Количество статей в научных журналах, индексируемых в базе данных Scopus	ед.	3	15
Количество статей в научных журналах индексируемых в базе данных European Reference Index for the Humanities	ед.	0	0
Количество созданных в рамках реализации проекта результатов интеллектуальной деятельности, имеющих государственную регистрацию и (или) правовую охрану в Российской Федерации	ед.	0	0

## В результате исследований получены следующие научные результаты:

- 1. Разработан метод нахождения подрешеток в сложных кристаллических соединениях на основе точечных уайков-множеств для установления дополнительной скрытой симметрии кристаллов.
- 2. В суперионных кристаллах со структурами перовскита, серебросодержащих иодидах, халькогенидах найдены анизотропные подрешетки, симметрия которых проявляется в спектрах элементарных возбуждений.
- 3. Наличие подрешеток в суперионных кристаллах приводит к появлению низкоэнергетических оптических фононов, влияющих на ионный перенос.
- 4. Разработано программное обеспечение для учета многочастичных эффектов при вычислении оптических функций, структуры экситонов, параметров химической связи, позволяющее с высокой точностью моделировать электронную подсистему.
- 5. Для тетраэдрических алмазоподобных полупроводников с решетками сфалерита, халькопирита, антихалькопирита, дефектного халькопирита из первых принципов вычислены параметры кристаллической структуры, фундаментальные характеристики зонных и колебательных спектров, оптические функции, механические параметры, объяснены и предсказаны физические и физико-химические свойства как реальных, так и гипотетических соединений, даны рекомендации для практического использования.
- 6. На основе первопринципных методов с учетом дисперсионных сил выполнено исследование зависимостей зонных и колебательных спектров, параметров химической связи от давления в интервале от 0 до 20 ГПа, построены уравнения состояния для органических полупроводников нафталина и пентацена, хорошо описывающее эксперимент где он имеется и дающее предсказание на неизученную область.
- 7. Для кристаллических нитратов щелочных металлов и нитрата аммония на основе первопринципных вычислений в интервале давлений от 0 до 3 ГПа установлена нелинейная барическая зависимость параметров кристаллической структуры, энергетических зон, химической связи, объясняющая поведение этих веществ в условиях давления.
- 8. Изменение атомной и электронной структуры перхлорат и хлорат-анионов при адсорбции оксида и пероксида исследовано первопринципными методами в модели нанослоя на поверхности кристалла путем вычисления геометрических, структурных, электронных параметров систем  $\text{Na}_2\text{O}_2/\text{NaClO}_4(001)$ ,  $\text{K}_2\text{O}/\text{KClO}_4(001)$ .
- 9. Установлены критерии взрывного разложения некоторых органических инициирующих взрывчатых веществ при возбуждении лазерным и электронным пучком на основе феноменологического подхода, учитывающего размерные и физико-химические параметры кристаллов.

# Список публикаций

- 1. Zarechina E. S., Karzhavykh D. S., Kravchenko N. G., Nikolaeva E. V., Poplavnoi A. S. Peculiarities of the Band Structure Formation in the  $\text{Cu}_2\text{O}$  and  $\text{Ag}_2\text{O}$  Crystals with a Cuprite Structure // Russian Physics Journal, Vol. 58, No. 4. - p. 574-582.
- 2. Poplavnoi A.S. Sublattices in crystals based on Wyckoff sets // Moscow University Physics Bulletin, Volume 70, Issue 3, pp. 175-180.
- 3. Fedorov, I.A. First principles study of the electronic structure and phonon dispersion of naphthalene under pressure / I.A. Fedorov, F. Marsusi, T.P. Fedorova, Y.N. Zhuravlev // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2015. V. 83, P. 24–31.
- 4. Basalaev, Yu.M. Electronic structure and dynamics of lattice of a crystal  $\alpha\text{-ZnCl}_2$  / Yu.M. Basalaev, S.A. Marinova // Journal of Structural Chemistry. – 2015. – V. 56, N 5. - p. 881-886.
- 5. Basalaev, Yu.M. Ab initio and phenomenological modeling of a phonon spectrum superfirm cp-BC2N / Yu.M. Basalaev, A.V. Kopytov, T.Yu. Pavlova, A.S. Poplavnoi // Russian Physics Journal. – 2015. – V. 58. - p. 978-986.
- 6. Basalaev, Yu.M. Modelling of electronic structure of crystal  $\text{Cu}_2\text{BrCl}$  with a lattice of antichalcopyrite / Yu.M. Basalaev, A.V. Kosobutsky, E.N. Malysheva // Russian Physics Journal. – 2015. – V. 58. - p. 1201-1204.
- 7. Korabelnikov D.V., Zhuravlev Yu. N. Structure and electronic properties of  $\text{Na}_2\text{O}_2/\text{NaClO}_4(001)$ ,  $\text{K}_2\text{O}/\text{KClO}_3(001)$  systems // Journal of Structural Chemistry. – 2015. – V. 56, No. 2, pp. 203-208.
- 8. Korabelnikov D.V., Zhuravlev Yu. N. Structure and electronic properties of  $\text{MNO}_3$  (M: Li, Na, K,  $\text{NH}_4$ ) under pressure: DFT-D study // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2015. V. 83, P. 38-47.
- 9. Korabelnikov D.V., Zhuravlev Yu. N. A first-principles investigation of surface oxidation of lithium in the slab model // Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces. 2015. - V.513, No. 3, pp. 337-340.
- 10. Dolgachev V.A., Khanef A.V. Ignition of organic explosives by a laser pulse // EPJ Web of Conferences, V. 82, 01023, 2015.
- 11. Khanef A.V., Ivanov G.A., Duginov E.V. Influence of absorbed energy distribution along beam radius on ignition threshold of condensed explosives // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, V. 81, 012023, 2015.
- 12. Dolgachev V.A., Khanef A.V. Influence of the thickness absorbing film on the PETN ignition threshold by a laser pulse // MATEC Web of Conferences, V. 23, 01067, 2015.
- 13. Ivanov G.A., Khanef A.V. Mechanism of the Thermal Ignition of Organic Explosives by an Electron Beam // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2015, Vol. 9, No. 4, pp. 625–630.
- 14. A.B. Gordienko, S.I. Filippov Calculation of characteristics of the absorbance of fluorides with regard to many-particle effects // Journal of Structural Chemistry. – 2015. – V. 56, No. 7, pp. 601-607.
- 15. Kravchenko N.G., Poplavnoi A. S. Electronic structure and chemical bond in  $\text{KN}_3$  And  $\text{KSCN}$  crystals // Journal of Structural Chemistry. 2015. - Vol. 56, No. 6, pp. 1029-1035.