

НАПРАВЛЕНИЯ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Разработка теоретических основ физических и физико-химических свойств кристаллических соединений сложного состава

Научные руководители:

Поплавной А.С. - зав. кафедрой теоретической физики, д.ф.-м.н., профессор, заслуженный деятель науки РФ, действительный член МАН ВШ, почетный профессор Кузбасса,
Журавлёв Ю.Н. – зав. кафедрой общей физики, д.ф.-м.н., профессор,
Ханефт А.В. – д.ф.-м.н., профессор КТФ;
Гордиенко А.Б. - д.ф.-м.н., профессор КТФ;
Басалаев Ю.М. - д.ф.-м.н., профессор КТФ;
Кравченко Н.Г. – к.ф.-м.н., доцент КТФ;
Федоров И.А. – к.ф.-м.н., доцент КТФ;
Корабельников Д.В. – к.ф.-м.н., доцент КТФ

Гранты, контракты (2011-2015):

1. Поплавной А.С. № 2.9.08. Исследование колебательного и электронного строения фазовых переходов в рядах алмазоподобных полупроводников, термодинамически лабильных и суперионных диэлектриках и наноструктурах на их основе. 2008-2012. Тем. план по заданию Федерального агентства по образованию РФ (подраздел 0110 - фундаментальные научные исследования).
2. Корабельников Д.В. Исследование тепловых свойств кислородсодержащих соединений. 2011-2012. Грант Губернатора Кемеровской области для поддержки молодых учёных-кандидатов наук.
3. Корабельников Д.В. ГК № 16.740.0591. Физические и физико-химические свойства кислородсодержащих соединений. 2011-2013. ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России».
4. Федоров И.А. Первопринципное исследование физико-химических свойств молекулярных кристаллов углеводов и взрывчатых веществ. 2012. РФФИ «Мой первый грант».
5. Корабельников Д.В. ФЦП Мероприятие 1.3.1. «Проведение научных исследований молодыми кандидатами наук.» г/к № 14.740.11.0591 от 30.05.11 по 25.10.13г. «Физические и физико-химические свойства кислосодержащих соединений, возможные механизмы разложения с эффективным выделением кислорода». 2013 г.
6. Поплавной А.С. (н.р.) АВЦП Мероприятие 1. № 3.2137.11. "Исследование механических, термических, барических свойств рядов термодинамически лабильных суперионных соединений и наноструктур на их основе" 2013 г.
7. Федоров И.А. грант Губернатора Кемеровской области для поддержки молодых ученых – кандидатов наук. «Первопринципное исследование физико-химических свойств типичных молекулярных кристаллов взрывчатых веществ». Срок реализации: 1.01.2013 – 31.10.2013.
8. Федоров И.А. РФФИ, грант № 12-02-31353-мол «Первопринципное исследование физико-химических свойств молекулярных кристаллов углеводов и взрывчатых веществ». Срок реализации: 1.01.2013 – 31.12.2013.
9. Поплавной А.С. Базовая часть Госзадания № 2014/64 «Моделирование электронных и колебательных спектров, физических и физико-химических свойств энергетических материалов, суперионных соединений, тепловыделяющих элементов ядерных реакторов»
10. Поплавной А.С. Проектная часть Госзадания № 3.1235.2014К «Моделирование электронных и колебательных спектров, физических свойств сложных полупроводниковых и диэлектрических кристаллов, включая энергетические материалы, суперионные соединения и тепловыделяющие элементы ядерных реакторов»

Основные публикации:

Монографии (2011-2015):

1. Под общей ред. Поплавного А.С. Теория физических и физико-химических свойств сложных кристаллических соединений с различным типом химической связи. 23 п. л. 2012. ООО «Инт»
2. Ханефт А.В. Дефекты Френкеля и Шоттки в ионных кристаллах. 298 с. 2012. LAMBERT Academic Publishing. Deutschland. – 2012
3. Basalaev Yu. M. and Poplavnoi A. S. Crystal chemistry, electronic and vibrational structure of compounds with chalcopyrite lattice. In: Chalcopyrite: Chemical Composition, Occurrence and Uses / Ed. Deborah Cronin. Nova Science Publishers, Inc.: New-York, USA, 2014, P.194 (pp.115-173). ISBN: 978-1-63321-188-9 (in English)

Научные публикации в изданиях, определенных ВАК, Web of Sciences, Scopus (2011-2015):

1. Ю.М. Басалаев, П.В. Демушин. Оптические свойства кристаллов Mg-IV-V2. 29 с. // Ред. журн. «Изв. вузов. Физика». – Томск, 2011
2. Ю.М. Басалаев, П.В. Демушин, Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, А.В. Силинин. Влияние симметрии подрешеток на зонную структуру кристалла MgSiN2. С. 82-87 // Известия вузов. Физика. – Томск. – 2011. – А.В. Т. 54, № 10
3. Ю.М. Басалаев, П.В. Демушин, Е.В. Николаева, А.В. Силинин. Зонная структура и ее генезис из состояний подрешеток в орторомбическом MgGeN2. С. 39-43 // Вестник МГУ. Серия 3. Физика и астрономия. – 2011. – Т. 66, № 1
4. Ю.М. Басалаев, М.А. Коротков. Электронное строение кристаллов A32B5C5. 11 с. // Ред. журн. «Изв. вузов. Физика». – Томск, 2011
5. Ю.М. Басалаев, М.А. Коротков. Электронное строение кристаллов A3B3C52. 24 с. // Ред. журн. «Изв. вузов. Физика». – Томск, 2011
6. В.Н. Брудный, А.В. Кособуцкий, Н.Г. Колин, А.В. Корулин, Брудный В.Н. Изменение структурных параметров решетки и электронных спектров пленок n-GaN на сапфире при облучении реакторными нейтронами. С. 461–467 // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, № 4
7. А.Б. Гордиенко, С.И. Филиппов. Реализация самосогласованного расчета электронной структуры кристаллов с помощью обобщенного метода моментов. 11 с. // Ред. ж. Изв. высш. учеб. заведений. Физика. – Томск, 2010
8. А.Б. Гордиенко, С.А. Щучкин. Метод сетки Лагранжа для многоэлектронных атомов. 29 с. // Ред. ж. Изв. высш. учеб. заведений. Физика. – Томск, 2011.
9. Ю.Н. Журавлев, В.М. Лисицын. Ударно-деформационный механизм иницирования взрывного разложения азида серебра при импульсном электронном и лазерном воздействии. С. 259-264 // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, № 1/2
10. Ю.Н. Журавлев, В.М. Лисицын. Параметр Грюнайзена для азида серебра. С. 35-41 // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, № 7
11. Ю.Н. Журавлев, В.М. Лисицын. Первопринципные исследования колебательной структуры и термодинамических функций азида серебра. С. 134 – 140 // Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 319, № 2
12. Yu.N. Zhuravlev, O.S. Obolonskaya. A first-principles study of elastic properties of alkali-metal oxides. P. 776–784 // Russian Physics Journal. – 2011. – V. 53, N. 8
13. Д.В. Корабельников, М.В. Алейникова, Ю.Н. Журавлёв. Структура и электронные свойства (111)-поверхности оксидов щелочных металлов. С. 103–104 // Известия вузов. Физика. – 2011. – Т. 54, № 6

14. E.V. Nicolaeva, A.S. Poplavnoi, A.V. Silinin. Sublattices and special features of phonon spectra in crystals with the IN_4TE_3 structure. P. 769-775 // Russian Physics Journal. - 2011. - V. 53, № 8
15. А.С. Поплавной, А.В. Копытов, М.К. Уфимцев. Исследование фононных спектров тетрагонального кристалла $MgSiAs_2$ в базисе векторов поляризации подрешеток. С. 42–45 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – Т. 8, № 3
16. А.С. Поплавной, Т.П. Федорова. Вклады подрешетки анионов в энтропию и энтальпию кристаллов MeO_2 со структурой флюорита. С. 88–92 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – Т. 8, № 3
17. А.С. Поплавной, Т.П. Федорова. Фононные спектры и термодинамические свойства UO_2 , PuO_2 , NpO_2 , ThO_2 . С. 182–187 // *Известия вузов. Физика*. – 2011. – Т. 54. – № 1/3
18. А.С. Поплавной, Р.И. Филиппов. Граф подчинения сортов многогранников Дирихле-Вороного по принципу повышения симметрии. С. 86–89 // *Вестник Московского университета. Физика. Астрономия*. – 2011. – Т. 3, № 6
19. А.С. Поплавной, Р.И. Филиппов. Построение трансляционно-совместимых многогранников Дирихле-Вороного на основе параметров Зеллинга. С. 95-99 // *Известия ВУЗов. Физика*. - 2011. - Том № 54, выпуск 2
20. А.С. Поплавной, Р.И. Филиппов. Симметрия двух вложенных кубических подрешеток с осями голоэдрией, направленными под углами друг к другу. С. 53–66 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – Т. 8, № 2
21. Федоров И.А. Электронная структура кристаллического коронена. С. 114-118 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - Т. 8, № 3. - 2011
22. И.А. Федоров, Ю.Н. Журавлев, М.Ю. Киямов. Исследование влияния давления на структуру и физические свойства нафталина и антрацена из первых принципов. I. Свободные молекулы. С. 99 // *Известия вузов. Физика*. – 2011. – № 7
23. И.А. Федоров, Ю.Н. Журавлев, М.Ю. Киямов. Исследование влияния давления на структуру и физические свойства нафталина и антрацена из первых принципов. II. Кристаллы. С. 100 // *Известия вузов. Физика*. – 2011. – № 7
24. И.А. Федоров, Ю.Н. Журавлев, В.П. Бервено. Electronic structure and chemical bond in naphthalene and anthracene. P. 5679–5686 // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2011. - V. 13
25. А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов. Роль подложки при иницировании ТЭНа лазерным импульсом. С. 230–237 // *Известия ВУЗов. Физика*. – 2011. – Т. 54, № 1/2
26. А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов. Модель влияния подложки на иницирование РЕТН лазерным импульсом. С. 520-524 // Сер. “Космический вызов XXI века”, Т. 4, М.: ТОРУС ПРЕСС, 2011
27. А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов. Критерий иницирования взрывчатых веществ претерпевающих плавление коротким лазерным импульсом. С. 238–243 // *Известия ВУЗов. Физика*. – 2011. – Т. 54, № 1/2
28. А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов. Влияние зависимости коэффициента поглощения от температуры на критическую энергию зажигания конденсированного вещества лазерным импульсом. С. 127–136 // *Физика горения и взрыва*. – 2011. – Т. 47, № 4
29. А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов. Влияние зависимости коэффициента поглощения от температуры на условие зажигания конденсированного взрывчатого вещества лазерным импульсом. С. 496-499 // Сер. “Космический вызов XXI века”, Т. 4, М.: ТОРУС ПРЕСС, 2011
30. А.В. Ханефт. Автокатализ термического разложения азидов свинца дефектами Шоттки при малых степенях разложения. С. 303–307 // *Известия ВУЗов. Физика*. – 2011. – Т. 54, № 1/3
31. А.В. Ханефт. Расчет спектральной зависимости фототока и скорости фотохимического разложения азидов тяжелых металлов. С. 98–102 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – Т. 8, № 2

32. Ханефт А.В. Гетерогенный механизм разложения и низкопорогового инициирования азидов тяжелых металлов лазерным импульсом. С. 514-519 // Сер. "Космический вызов XXI века", Т. 4, М.: ТОРУС ПРЕСС, 2011
33. А.В. Ханефт, Е.В. Дугинов, В.А. Долгачев. Критерий инициирования лазерным импульсом взрывчатых веществ с температурой плавления ниже температуры зажигания. С. 195-199 // Ползуновский вестник. – 2011. – № 4-1
34. Е.В. Антропова, А.В. Копытов. Упругие волны в тетрагональном CuGaS_2 . С. 75-77 // Известия Высших учебных заведений. Физика. - 2012. - Томск. - Т. 55, № 8/2
35. Ю.М. Басалаев, А.Б. Гордиенко, С.И. Филиппов. Электронная структура кристалла CuBS_2 . С. 1655-1658 // Физика твердого тела. - 2012. - Т. 54, № 9
36. Yu.M. Basalaev, P.V. Demushin, E.V. Nikolaeva, A.S. Poplavnoi, A.V. Silinin. Influence of the sublattice symmetry on the Band structure of a MgSiN_2 crystal. P. 1145-1151 // Russian Physics Journal. - 2012. - V. 54, № 10
37. Ю.М. Басалаев, А.В. Кособуцкий, Е.Н. Малышева. Ab initio расчеты фононных спектров сверхрешеток GaSb/AlSb . С. 304-308 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2012. - Т. 9, № 3
38. Ю.М. Басалаев, А.В. Копытов, А.В. Кособуцкий, Е.Н. Малышева. Фононные спектры сверхрешеток CdS/CdSe . С. 97-99 // Известия Высших учебных заведений. Физика. - 2012. - Т. 55, № 8/2
39. Ю.М. Басалаев, С.А. Маринова. Электронное строение кристаллов b-SiO_2 , заполненных Mg и Cd . С. 471-474 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2012. - Барнаул. - Т. 9, № 4
40. Ю.М. Басалаев, С.А. Маринова. Роль подрешеток в формировании электронной структуры и химической связи в кристалле Zn_2SiO_4 с решеткой дефектного халькопирита. С. 24-27 // Журнал структурной химии. - 2012. - Т. 53, № 1
41. Ю.М. Басалаев, М.В. Стародубцева. Первопринципные расчеты электронной структуры кристаллов LiVAs ($\text{V}=\text{Mg}, \text{Ca}, \text{Zn}$ и $\text{C}=\text{N}, \text{P}, \text{As}$) с решеткой сфалерита. С. 349-352 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2012. - Барнаул. - Т. 9, № 3
42. М.В. Алейникова, Ю.Н. Журавлев, Д.В. Корабельников. Первопринципные исследования влияния давления на структуру и электронные свойства оксидов и пероксидов щелочных металлов. С. 19-24 // Известия вузов. Физика. - 2012. - № 5
43. М.В. Алейникова, Ю.Н. Журавлев, Д.В. Корабельников. Первопринципные расчеты термодинамических параметров пероксидов лития, натрия, калия. С. 24-30 // Известия вузов. Физика. - 2012. - № 6
44. М.В. Алейникова, Ю.Н. Журавлев, Д.В. Корабельников. Расчеты ab initio термодинамических параметров оксидов лития, натрия, калия под давлением. С. 1427-1434 // Физика твердого тела. - 2012. - Т. 54, № 7
45. M.V. Aleinikova, Yu.N. Zhuravlev, D.V. Korabelnikov. Ab initio calculations of thermodynamic parameters of lithium, sodium and potassium peroxides. P. 622-628 // Russian Physics Journal. – 2012. - V. 55, N 6
46. М.В. Алейникова, Ю.Н. Журавлев, Д.В. Корабельников. Структура и электронные свойства поверхности пероксидов щелочных металлов. С. 652-657. // Журнал структурной химии. - 2012. - Т. 53, № 4
47. Ю.Н. Журавлев, М.Ю. Киямов, И.А. Федоров. Первопринципное исследование кристаллической структуры и уравнения состояния нафталина и антрацена. С. 425-431 // Журнал структурной химии. - 2012. - Т. 53, № 3
48. Ю.Н. Журавлев, И.А. Федоров. Электронная структура перилена из первых принципов. С. 95-97 // Известия Высших учебных заведений. Физика. - 2012. - Томск. - Т. 55, № 8/2

49. Ю.Н. Журавлев, И.А. Федоров. Электронная структура тетранитрата пентаэритрита в рамках DFT-D. С. 332-337 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2012. - Барнаул. - Т. 9, № 3
50. I.A. Fedorov, Y.N. Zhuravlev, V.P. Berveno. Properties of crystalline coronene: Dispersion forces leading to a larger van der Waals radius for carbon. P. 1438-1444 // *Phys. Status Solidi B*. - 2012. - V. 249, № 7
51. Д.В. Корабельников. Структура и электронные свойства поверхности LiNO₃. С. 328-331 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2012. - Барнаул. - Т. 9, № 3
52. А.В. Копытов, А.С. Поплавной. Исследование фононных спектров тетрагональных кристаллов LiPN₂ и NaPN₂ в базе векторов поляризации их подрешеток. С. 87-88 // *Известия Высших учебных заведений. Физика*. - 2012. - Томск. - Т. 55, № 8/2
53. А.В. Копытов, А.С. Поплавной, М.К. Уфимцев. Генезис фононного спектра из состояний подрешеток в кристалле CuGaS₂. С. 436-439 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2012. - Т. 9, № 4
54. А.С. Поплавной, Т.П. Федорова. Применение различных методов вычисления факторов Дебая-Валлера в соединениях с существенно различающимися массами ионов на примере кристаллов ZrO₂. С. 99-101 // *Известия Высших учебных заведений. Физика*. - 2012. - Т. 55, № 8/2
55. А.С. Поплавной, Т.П. Федорова. Фононные спектры и факторы Дебая-Валлера CeO₂. С. 324-327 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2012. - Т. 9, № 3
56. А.С. Поплавной, Р.И. Филиппов. Wусkoff - подрешетки в пространственных группах тетрагональной сингонии // *Известия высших учебных заведений. Физика. Деп ВИНТИ № 238-13-2012 от 15.05.2012*
57. В.А. Долгачев, А.В. Ханефт. Моделирование инициирования ТЭНа лазерным импульсом в области прозрачности образца. С. 405-410 // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. - 2012. - Т. 9, № 3
58. В.А. Долгачев, А.В. Ханефт. Моделирование инициирования тэна лазерным импульсом наносекундной длительности. С. 1-8 // *Химическая физика и мезоскопия*. - 2012. - Т. 14, № 4
59. Е.В. Дугинов, Г.А. Иванов, А.В. Ханефт. Моделирование инициирования ТЭНа пучком электронов наносекундной длительности. С. 28-39 // *Химическая физика и мезоскопия*. - 2012. - Т. 14, № 1
60. Е.В. Дугинов, А.В. Ханефт. Влияние плавления на критическую энергию зажигания конденсированного взрывчатого вещества коротким лазерным импульсом. С. 1-7 // *Физика горения и взрыва*. - 2012. - Т. 48, № 6
61. Fedorov I. A. Structural and electronic properties of perylene from first principles calculations / I. A. Fedorov, Y. N. Zhuravlev, V. P. Berveno // *Journal of Chemical Physics*. - 2013. - V.138. - 094509.
62. Gordienko A. B. Electronic structure of the CuBS₂ crystal // *Physics of Solid State*, 2012, vol.54, p.1764.
63. Gordienko A.B. Kernel polynomial method as an efficient O(N²) scheme for optical spectra calculations including electron-hole interaction / A.B. Gordienko, S.I. Filippov // *Phys. Status Solidi B*. - 2013. - P. 1-5 (DOI 10.1002/pssb.201350015.)
64. Гордиенко А.Б. Kroning-Penney model with adaptive plane wave basis / А.Б. Гордиенко, Ю.А. Кабанов // *Russian physics journal*. 2013. - V. 55, N 10. - P. 1232-1234
65. Долгачев В.А. Criterion of initiation of explosive materials by short laser pulse with fusing temperature less than ignition temperature / В.А. Долгачев, Е.В. Дугинов, А.В. Ханефт // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2012. - Т. 55. - С. 66-70.

66. Копытов А.В. Genesis of the phonon spectra of A2B4C25 and A1B3C26 crystals with a chalcopyrite lattice from the vibrational states of their sublattices / А.В. Копытов, А.С. Поплавной, М.К. Уфимцев // Journal of Structural Chemistry.2013. - V. 54, N 5. - P. 815-821.
67. Поплавной А.С. Pseudosymmetry in crystalline compounds with highly symmetric sublattices / А.С. Поплавной // Journal of Structural Chemistry.2013. - V. 54, N 1. - P. 92-96.
68. Korabel'nikov D. V. Structure and Electronic Properties of Oxyanionic Crystal Surfaces / D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2013. - V. 7. - P. 1067-1071.
69. Korabel'nikov D. V. Structure and Electronic Properties of Oxyanionic Crystal Surfaces / D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev // Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. - 2013. - V. 7. - P. 1067-1071.
70. Korabel'nikov D. V. Theoretical study of the thermodynamic properties of lithium, sodium, and potassium nitrates / D. V. Korabel'nikov, Yu. N. Zhuravlev / Physics of the Solid State. - 2013. - V. 55, № 8. - P. 1765-1772.
71. Иванов Г.А. Radiation-thermal mechanism of PETN initiation in the absorption region of the electron beam / Г.А. Иванов, А.В. Ханефт // Известия высших учебных заведений. Физика.2012. - Т. 55. - С. 71-75.
72. Ivanov G.A. Radiation-Thermal Mechanism of initiation of PETN in the Region of Absorption of a Nanosecond-Duration Electron Beam / Ivanov G.A., Khaneft A.V. // Russian Journal of Physical Chemistry B. 2013. Vol. 7, No. 6. – P. 741-747.
73. Гордиенко А. Б. Модель Кронига-Пенни с базисом адаптивных плоских волн / Гордиенко А. Б., Кабанов Ю. В. // Изв. высш. учеб. заведений. Физика. – 2012 , т.55, № 10. С.114.
74. Поплавной А.С. Низкоэнергетические оптические фононы в суперионных кристаллах MeF2 и MeO2 / А.С. Поплавной, Т.П. Федорова // Известия высших учебных заведений. Физика.2013. - Т. 56, № 8/3. - С. 138-141
75. Гордиенко А. Б. Градиентный потенциал Бекке-Джонсона в расчетах электронной структуры кристаллов / Гордиенко А. Б., Филиппов С. И.; Ред. ж. Изв. высш. учеб. заведений. Физика. – Томск, 2012. – 59 с.: ил. – Библиогр. 68 назв. – Русс. – Деп. в ВИНТИ, Рег.№.145-B2013, от 23.05.2013
76. Гордиенко А. Б. Интерполяция электронной структуры кристаллов с базисом Ширли / Гордиенко А. Б., Шучкин С. А.; Ред. ж. Изв. высш. учеб. заведений. Физика. – Томск, 2012. – 40 с.: ил. – Библиогр. 23 назв. – Русс. – Деп. в ВИНТИ, Рег.№.144-B2013, от 23.05.2013.
77. Корабельников Д.В. Теоретическое исследование термодинамических свойств нитратов лития, натрия, калия / Д.В. Корабельников, Ю.Н. Журавлев // Физика твердого тела. - 2013. - Т. 55, Вып. 8. - С. 1651-1658
78. Федоров И.А. Электронная структура пентацена из первых принципов / И.А. Федоров, Ю.Н. Журавлев, М.Ю. Киямов // Известия высших учебных заведений. Физика. - 2013. - Т. 56, № 8/3. - С. 167-168.
79. Копытов А.В. Генезис фононных спектров MgXP2 с решеткой халькопирита из колебательных состояний их подрешеток / А.В. Копытов, А.С. Поплавной, М.К. Уфимцев // Известия высших учебных заведений. Физика.2013. - Т. 56, № 8/3. - С. 189-192
80. Копытов А.В. Генезис фононных спектров кристаллов A2B4C25 и A1B3C26 с решеткой халькопирита из состояний их подрешеток / А.В. Копытов, А.С. Поплавной, М.К. Уфимцев // Журнал структурной химии.2013. - Т. 54, № 5. - С. 815-821
81. Поплавной А.С. Псевдосимметрия в кристаллических соединениях с высокосимметричными подрешетками / А.С. Поплавной // Журнал структурной химии.2013. - Т. 54, № 1. - С. 99-103
82. Ханефт А.В. Механизм задержки проводимости при импульсном облучении галогенидов серебра // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10. № 1. – С. 25-30.

83. Ханефт И.Г., Ханефт А.В. Электрический пробой поликристаллических таблеток перхлората аммония // Химическая физика и мезоскопия. 2013. Т. 15. № 1. – С. 34-40.
84. Иванов Г.А., Ханефт А.В. Влияние параметров пучка электронов на зажигание энергетических материалов // Химическая физика и мезоскопия. 2013. Т. 15. № 4. – С. 523-529.
85. Иванов Г.А., Ханефт А.В. Радиационно-термический механизм инициирования ТЭНа в области поглощения пучка электронов наносекундной длительности // Химическая физика. 2013. Т. 32. № 12. – С. 38-44.
86. Гордиенко А.Б. Градиентный потенциал Бекке-Джонсона в расчетах электронной структуры кристаллов / А.Б. Гордиенко, С.И. Филиппов // Известия высших учебных заведений. Физика, Томск, 2013. - 59 с. Деп. в ВИНТИ, 23.05.2013, № 145-B2013
87. Гордиенко А.Б. Итерполяция электронной структуры с базисом Ширли / А.Б. Гордиенко, С.А. Щучкин // Известия высших учебных заведений. Физика, Томск, 2013. - 59 с. Деп. в ВИНТИ, 23.05.2013, № 144-B2013
88. Басалаев Ю.М. Первопринципные расчеты электронной структуры кристаллов LiB_2C_5 ($\text{B}=\text{Mg}, \text{Ca}, \text{Zn}$ и $\text{C}=\text{N}, \text{P}, \text{As}$) / Ю.М. Басалаев, М.В. Стародубцева // Известия высших учебных заведений. Физика. - 2013 - 13 с. Деп. в ВИНТИ, 19.07.2013, № 213-B2013
89. Басалаев Ю.М. Вычисление электронной структуры кристаллов LiInSe_2 , CuInSe_2 и твердых растворов на их основе / Ю.М. Басалаев, Е.Ю. Каширцева // Известия высших учебных заведений. Физика. - 2013 - 13 с. Деп. в ВИНТИ, 18.06.2013, № 171-B2013
90. Антропова, Е.В., Копытов А.В. Влияние давления на анизотропию распределения упругих волн в кристаллах CuAlSc_2 CuGaSc_2 // Изв.вузов. Физика.- 2013.- № 8/3.- С.198-200
91. Ханефт А.В., Долгачев В.А., Дугинов Е.В., Иванов Г.А. Критерии зажигания энергетических материалов лазерным и электронным импульсами // Вестник КемГУ. 2013. Т. 3. №3 (55). – С. 31-39.
92. Нефёдова Д.С. Особенности структуры и физических свойств некоторых суперионных кристаллов / Д.С. Нефёдова (Каржавых), Е.В. Николаева, А.С. Поплавной, Т.П. Федорова // Вестник КемГУ. - 2013. - № 3 (55), Т. 3 - С. 22-30
93. Корабельников Д. В. Структура и электронные свойства поверхности оксианионных кристаллов / Д. В. Корабельников, Ю. Н. Журавлев // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – № 9. – С. 1-5.
94. Федорова, Т. П., Поплавной А.С. Термодинамические функции кристалла CeO_2 со структурой флюорита и его подрешеток // // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2012. – Т. 9. – № 4/2. – С. 603–606.
95. Fedorov I. A., Zhuravlev Y. N. Hydrostatic pressure effects on structural and electronic properties of TATB from first principles calculations // Chem. Phys. – 2014, V. 436-437. – P. 1-7.
96. Gordienko A. B., Filippov S.I. Kernel polynomial method as an efficient $O(N^2)$ scheme for optical spectra calculations including electron-hole interactions // Phys. Stat. Sol. B., 2014, V. 251, № 3, p. 628-632.
97. Khanef A.V., Dolgachev V.A. Simulation of Initiation of PETN by a Nanosecond Laser Pulse in the weak Absorption region // Combustion, Explosion, and Shock Waves, 2014, Vol. 50, No. 1. P. 105-112.
98. А. В. Ханефт, В. А. Долгачев Моделирование инициирования тэна лазерным импульсом наносекундной длительности в области слабого поглощения // Физика горения и взрыва, 2014, т. 50, N- 1. С. 115-123
99. Basalaev Yu. M. New diamond-like compounds with anti-chalcopyrite structure // Russian Physics Journal. – 2014. – V. 57, № 4. – pp.558-560.

100. Basalaev Yu. M. Features of the Band Structure of $(\text{CuInSe}_2)_{1-x}(\text{MeSe})_x$ Alloys (Me=Mn, Fe) / Sh.M. Hasanli, Yu.M. Basalaev, U.F. Samedova // Semiconductors. – 2014. – V. 48, N. 4. – P. 417–422.
101. Kosobutsky A.V., Basalaev Yu.M. Electronic band structure of LiInSe_2 : A first-principles study using the Tran-Blaha density functional and GW approximation // Solid State Communications. – 2014. – V.199. – P.17–21.
102. Басалаев Ю.М., Стародубцева М.В. Первопринципные расчеты электронной структуры кристаллов LiBN (B=Mg, Ca, Zn) // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 619-622.
103. Кравченко Н.Г., Поплавной А.С., Яцин А.А. Химическая связь в тиоцианате калия // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 623-627.
104. Басалаев, Ю.М. Вычисление электронной структуры кристаллов LiInSe_2 , CuInSe_2 и твердых растворов на их основе / Ю.М. Басалаев, Е.Ю. Каширцева // Известия вузов. Физика, 2014, Т. 57, № 1, С. 124b.
105. Иванов Г.А., Дугинов Е.В., Ханефт А.В. Влияние распределения плотности потока энергии электронов по радиусу пучка на критическую энергию зажигания конденсированного вещества // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 578-582.
106. Кравченко Н.Г., Поплавной А.С. Первопринципные исследования электронной структуры AgF при высоких давлениях // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 583-587.
107. Антропова Е.В., Копытов А.В. Elastic waves in CdGeAs_2 with chalcopyrite structure// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 664-666.
108. Копытов А.В. Фононные спектры композиционных сверхрешеток AlAs/AlP / А.В. Копытов, Е.Н. Малышева, А.В. Кособуцкий // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2014. – Т. 11, №1. – С. 26-28.
109. Копытов А.В., Малышева Е.Н., Кособуцкий А.В., Басалаев Ю.М. Первопринципные расчеты электронных и колебательных спектров сверхрешеток $(\text{AlAs})_n(\text{AlP})_n$ // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - Т.11, №4/2. - С. 605-609.
110. Басалаев, Ю. М. Особенности зонной структуры твердых растворов $(\text{CuInSe}_2)_{1-x}(\text{MeSe})_x$ (Me=Mn,Fe) / Ш. М. Гасанли, Ю. М. Басалаев, У. Ф. Самедова // Физика и техника полупроводников, 2014, т. 48, № 4, с.433-437.
111. Басалаев, Ю. М. Новые алмазоподобные соединения со структурой антихалькопирита // Известия вузов. Физика. – 2014. – Т. 57, № 4. – С. 121-122.
112. Федорова Т.П., Поплавной А.С. Температурная зависимость колебательных спектров диоксида циркония ZrO_2 // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 660-663.
113. Копытов А.В., Павлова Т.Ю., Поплавной А.С. Фононные спектры кристаллов BC_2N с решеткой халькопирита / Фундаментальные проблемы современного материаловедения. Т. 11, № 4, 2014. с.529-532.
114. Федоров И.А. Первопринципное исследование влияния давления на электронную структуру гексогена// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. - 2014. - т.11, №4/2. - С. 678-681.
115. Крашенинин, В.И. К механизму разложения азиды серебра в бесконтактном электрическом поле / В.И. Крашенинин, А.В. Ханефт// Химическая физика и мезоскопия, 2014. – Т. 16. - №4. – С. 506-512.
116. Степанов А.Ю. Формирование и исследование оптических свойств тонких пленок $\text{TiO}_2\text{-Ag}$ и $\text{TiO}_2\text{-AgI}$ / Степанов А.Ю., Сотникова Л.В., Владимиров А.А., Ханефт А.В., Просвиркина Е.В., Титов Ф.В., Дягилев Д.В. Ползуновский вестник, №3. 2014. С. 53-57.

117. Басалаев Ю. М., Басалаева О. Г. Формирование информационной картины мира как методологического средства изучения информационной реальности // *Международный журнал экспериментального образования*. – 2014. – №5-2. – С. 63-64.
118. Поплавной А.С. Скрытая анизотропия, многомерные решетки, электронные и колебательные спектры сложных кристаллических соединений // *Вестник КемГУ*. – 2014. – №2 (58), Т. 1. – С. 177-189.
119. Поплавной А.С. Структурные подрешетки, псевдосимметрия в сложных кристаллических соединениях // *Вестник КемГУ*. – 2014. – №1 (57), Т. 2. – С. 101-113.
120. Zarechina E.S. Peculiarities of the band structure formation in the Cu₂O and Ag₂O crystals with a cuprite structure / E.S. Zarechina, D.S. Karzhavykh, N.G. Kravchenko, E.V. Nikolaeva, A.S.Poplavnoi // *Russian Physics Journal*, Vol. 58, No. 4, pp 574-582; Россия
121. Poplavnoi A.S. Sublattices in crystals based on Wyckoff sets; *Moscow University Physics Bulletin*, 2015, Volume 70, Issue 3, pp 175-180; Россия
122. Fedorov I.A. Hydrostatic pressure effects on structural and electronic properties of pentacene from first principles calculations / I. A. Fedorov, E. S. Rubtsova, N. S. Khaydukova, Y. N. Zhuravlev // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2015. V. 81. P. 012120.
123. 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.
124. Basalaev Yu.M. Electronic structure and dynamics of lattice of a crystal a-ZnCl₂/ Yu.M. Basalaev, S.A. Marinova // *Journal of Structural Chemistry*. – 2015. – V. 56, N 5.
125. Basalaev Yu.M. Features of distribution of the charge of valent electrons in LiBiIXV crystals/ Yu.M. Basalaev, M.V. Starodubtseva // *Journal of Structural Chemistry*. – 2015. – V. 56.
126. Basalaev Yu.M. Influence of sublattices on formation of band structure of crystals with a chalcopyrite lattice: B₂CN, BC₂N, BCN₂ // *Journal of Structural Chemistry*. – 2015. – V. 56.
127. Basalaev Yu.M. First-principles 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.
128. Basalaev Yu.M. Modelling of electronic structure of crystal Cu₂BrCl with a lattice of antichalcopyrite / Yu.M. Basalaev, A.V Kosobutsky, E.N. Malysheva // *Russian Physics Journal*. – 2015. – V. 58.
129. Korabelnikov D.V., Zhuravlev Yu. N. Structure and electronic properties of Na₂O₂/NaClO₄(001), K₂O/KClO₃(001) systems // *Journal of Structural Chemistry*. – 2015. – V. 56, No. 2, pp. 203-208.
130. Korabelnikov D.V., Zhuravlev Yu. N. Structure and electronic properties of MnO₃ (M: Li, Na, K, NH₄) under pressure: DFT-D study // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2015. V. 83, P. 38-47.
131. 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.
132. Dolgachev V.A., Khaneft A.V. Ignition of organic explosives by a laser pulse // *EPJ Web of Conferences*, V. 82, 01023, 2015.
133. Ivanov G.A., Khaneft A.V. Ignition of organic explosives by an electron beam // *EPJ Web of Conferences*, V. 82, 01012, 2015.
134. Khaneft 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.
135. Dolgachev V.A., Khaneft 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.
136. Ivanov G.A., Khaneft 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.

137. 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.