|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **Списокпубликаций**

| № | Название | Издание | Стр. | Авторы |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Применение метода двухцентрового модельного потенциала для расчетов систем с двумя валентными электронами | Вестн. Моск. ун-та, сер. 2 химия, 1980, Т. 21, № 2 | 134-138 | А.В.НемухинН.Ф.СтепановВ.Ф.ХрустовА.А.Сафонов |
|  | Теоретическое изучение электронных состояний двухатомных молекул одиннадцатиэлектронной серии. Молекулы BeN и BC | Журн. физ. химии, 1981, Т. 55, № 7  | 1972-1795  | А.В.МитинА.И.ДементьевА.А.СафоновВ.Ф.Хрустов |
|  | Эффективность смешанного орбитального базиса в расчетах основных состояний молекул H2, Li2 и иона Li2+  | Вестн. Моск. ун-та, сер. 2 химия, 1982, Т. 23, № 1 | 27-30 | А.А.СафоновВ.Ф.ХрустовН.Ф.Степанов |
|  | Неэмпирические расчеты методом КВ вертикальных энергий электронных переходов в линейных молекулах C2, C3, C4 | Теор. эксперим. химия, 1982, Т. 18, № 5 | 608-612 | А.В.НемухинН.Ф.СтепановА.А.Сафонов |
|  | Расчет потенциальных кривых низколежащих электронных состояний LiBe и LiBe+ в смешанном орбитальном базисе методом ССП | Журн. структурн. химии, 1983, Т. 24, № 2 | 168-169 | А.А.СафоновВ.Ф.ХрустовН.Ф.Степанов |
|  | Комплекс программ для неэмпирических расчетов молекул | Вестн. Моск. ун-та, сер. 2 химия, 1983, Т. 24, № 1 | 38-39 | В.И.ПупышевВ.Я.СимкинА.А.СафоновВ.Ф.ХрустовА.И.ДементьевН.Ф.Степанов |
|  | Отбор конфигураций в методе конфигурационного взаимодействия | Вестн. Моск. ун-та, сер. 2 химия, 1984, Т. 25, № 2 | 161-164 | В.И.ПупышевВ.Я.СимкинА.А.СафоновА.И.Дементьев |
|  | Расчет потенциальных кривых низколежащих электронных состояний молекулы BeF | Журн. физ. химии, 1985, Т. 59, № 8 | 1970-1973 | А.А.СафоновВ.Ф.ХрустовН.Ф.Степанов |
|  | Проблемы квантовомеханических расчетов поверхностей потенциальной энергии возбужденных состояний молекул | В кн. Строение молекул (экспериментальные и расчетно-теоретические работы), М., Изд-во Моск. ун-та, 1986 | 229-245 | Н.Ф.СтепановА.В.НемухинВ.Ф.ХрустовА.А.Сафонов |
|  | Теоретическое исследование низколежащих электронных состояний молекулы MgN | Журн. физ. химии, 1986, Т. 60, № 7 | 1692-1696 | В.Ф.ХрустовА.В.ЗайцевскийА.А.СафоновА.И.ДементьевН.Ф.Степанов |
|  | Расчет электронной плотности молекулы в кристалле | Кристаллография, 1987, Т. 32, № 4 | 1015-1017 | А.А.Сафонов |
|  | Выращивание и структура кристаллов Hg3Te2I2 | Кристаллография, 1989, Т. 34, № 4 | 835-836 | В.А. ЛяховицкаяН.И. СорокинаА.А. Сафонов И.А. ВеринВ.И. Андрианов |
|  | Уточнение кристаллической структуры моногидрата аспарагина | Кристаллография, 1990, Т. 35, № 1 | 50-53 | В.И. СмирноваН.И. СорокинаА.А. Сафонов И.А. ВеринГ.Н. Тищенко |
|  | Электронная плотность формиат-иона в кристалле LiHCOOּH2O | Кристаллография, 1990, Т. 35, № 3 | 661-667 | А.А. Сафонов И.А. ВеринН.И. СорокинаБ.А. Меринов |
|  | Применение нелокального псевдопотенциала Аg в молекулярных расчетах. | Журн. физ. химии, 1991, Т. 65, № 3 | 712-715 | А.А. Сафонов А.А. Багатурьянц |
|  | Неэмпирический расчет структуры М-центра на поверхности AgBr(100): образование первичного центра Аg2. | Журн. физ. химии. 1993. Т. 67, № 1 | 80-86 | А.А. Багатурьянц А.А. Сафонов К.Б. Шелимов |
|  | Ab initio calculations of an M-center on the AgBr(100) surface: Formation, electronic structure and spectrum of a primary Ag2 cluster. | Chem. Phys. Letters. 1993. V. 201. № 1-4 | 84-88 | K.B. Shelimov A.A. Safonov A.A. Bagatur’yants |
|  | *Ab initio* Relativistic Pseudopotential Study of Small Silver and Gold Sulfide Clusters (M2S)n, n = 1 and 2 | Journal of Chemical Physics, 1998, vol. 109, № 8 | 3096-3107 | A.A. Bagatur’yantsA.A. SafonovH. StollH.-J. Werner |
|  | Atomistic modeling of chemical vapor deposition: silicon nitride CVD from dichlorosilane and ammonia | Materials Science in Semiconductor Processing, 2000, vol. 3, no. 1-2 | 23-29 | A.A. Bagatur’yantsK.P. NovoselovA.A. SafonovL.L. SavchenkoJ.V. ColeA.A. Korkin |
|  | Atomistic Simulation of Silicon Nitride CVD from Dichlorosilane and Ammonia: Theoretical Study of the Silicon Nitride Surface Structures and Reaction Mechanism | Surface Science, 2001, vol. 486, no. 3 | 213-225 | A.A. Bagatur’yantsK.P. NovoselovA.A. SafonovJ.V. ColeM. Stoker A.A. Korkin |
|  | The Role of Localized States in the Degradation of Thin Gate Oxides | Microelectronic Engineering, 2003, vol. 69, nos. 2-4 | 118-129  | G. BersukerA. KorkinL. FonsecaA. SafonovA. Bagatur’yantsH.R. Huff |
|  | Oxygen vacancies in tetragonal ZrO2: ab initio embedded cluster calculations | Microelectronic Engineering, 2003, vol. 69, nos. 2-4  | 629–632 | A.A. SafonovA.A. Bagatur’yantsA.A. Korkin |
|  | Atomistic Simulation of Silicon Nitride CVD from Dichlorosilane and Ammonia  | In *Predictive Simulation of Semiconductor Processing* *Status and Challenges,* [Springer Series in Materials Science](http://www.springeronline.com/sgw/cda/frontpage/0%2C10735%2C5-40118-69-1188230-0%2C00.html), Vol. 72, Dabrowski, J. and Weber, E.R. (Eds.), Springer Verlag, 2004 | 295-356  | A.A. Bagatur'yantsA.Kh. MinushevK.P. NovoselovA.A. SafonovS.Ya. UmanskiiA.S. VladimirovA. Korkin |
|  | Structure and electronic properties of zirconium and hafnium nitrides and oxynitrides  | J. Appl. Phys., vol. 97, no. 4 (2005) 044108 | 044108-1–5  | D.I. Bazhanov A.A. Knizhnik A.A. Safonov A.A. Bagatur’yants M.W. Stoker A.A. Korkin |
|  | First-principles investigation of the electronic properties of niobium and molybdenum mononitride surfaces | Surf. Sci., vol. 583, no. 1 (2005) | 69–79 | I.M. IskandarovaA.A. KnizhnikB.V. PotapkinA.A. SafonovA.A. Bagatur'yantsL.R.C. Fonseca  |
|  | Computational study of ZrSiO4 polymorphs  | Appl. Phys. Lett. vol. 88, 181913 (2006) | 1–3 | A.A. KorkinH. KamisakaK. YamashitaA.A. SafonovA.A. Bagatur'yants  |
|  | First-principles investigation of the WC/HfO2 interface properties  | J. Appl. Phys. vol. 99, 084104 (2006) | 1–5 | A.A. KnizhnikA.A. SafonovI.M. IskandarovaA.A. Bagatur’yantsB.V. PotapkinL.R.C. FonsecaM.W. Stoker |
|  | Segregation trends of the metal alloys Mo–Re and Mo–Pt on HfO2: A first-principles study | J. Appl. Phys. vol. 100, 013506 (2006)  |  | A. A. Knizhnik, A. V. Gavrikov, A. A. Safonov, I. M. Iskandarova, A. A. Bagatur'yants, B. V. PotapkinL. R. C. FonsecaM. W. Stoker |
|  | Detailed and Reduced Mechanisms of Jet A Combustion at High Temperatures  | Combustion Science and Technology, vol. 180, no. 10, 11 (2008)  | 1788 - 1802  | M. I. Strelkova I. A. Kirillov B. V. Potapkin A. A. Safonov L. P. Sukhanov S. Ya. Umanskiy M. A. Deminsky A. J. Dean B. Varatharajan A. M. Tentner |
|  | First-principles-based investigation of kinetic mechanism of SiC(0001) dry oxidation including defect generation and passivation | J. Appl. Phys. vol. 104, no. 9, 093508 (2008) |  | A. Gavrikov  A. Knizhnik A. Safonov A. Scherbinin A. Bagatur'yants B. Potapkin A. Chatterjee K. Matocha   |
|  | Low temperature n-butane oxidation skeletal mechanism, basedon multilevel approach | Combustion and Flame 157 (2010)  | 641–652 | M. I. Strelkova A. A. Safonov L. P. Sukhanov S. Ya. Umanskiy I. A. Kirillov B. V. Potapkin H. J. PasmanA. M. Tentner |

 |