2016

1. Computer Simulation of Shallow Traps Created by Impurity Molecules in Anthracene Crystal / A. V. Odinokov, A. A. Bagaturyants // J. Phys. Chem. C – 2016 – V. 120. – P. 25189-25195.
2. Electronic Structure and Energy Transfer in Europium(III)−Ciprofloxacin Complexes: A Theoretical Study / Tatiana B. Emelina, Alexandra Ya. Freidzon, Alexander A. Bagaturyants, and Vladimir E. Karasev // J. Phys. Chem. A. — 2016. — V. 120. — P. 7529−7537.
3. Force-field parameters for beryllium complexes in amorphous layers / Svetlana Emelyanova, Vladimir Chashchikhin, Alexander Bagaturyants // J. Mol. Model. — 2016. — V. 22. P. 215—223
4. Multiscale Modeling of Current Voltage Curve for Organic Single Layer Device / M. V. Alfimov, A. A. Bagaturyants, M. V. Bogdanova, A. V. Gavrikov, A. A. Knizhnik, D. N. Krasikov, A. V. Odinokov, B. V. Potapkin, I. A. Valuev, and V. E. Velikhov // Nanotechnologies in Russia. — 2016. — V. 11. — nos. 3-4 — P. 192-199.
5. Structures and Binding Energies of the Naphthalene Dimer in Its Ground and Excited States / N. O. Dubinets, A. A. Safonov, and A. A. Bagaturyants // J. Phys. Chem. A. — 2016. — V. 120. — P. 2779−2782.
6. Synthesis and photophysical properties of halogenated derivatives of (dibenzoylmethanato)boron difluoride. / Yuriy N. Kononevich, Nikolay M. Surin, Viacheslav A. Sazhnikov, Evgeniya A. Svidchenko, Vladimir M. Aristarkhov, Andrei A. Safonov, Alexander A. Bagaturyants, Mikhail V. Alfimov, Aziz M. Muzafarov // Spectrochimica Acta Part A. — 2017. — Vol. 175. — P. 177-184.

2015

1. A.E. Masunov, D. Anderson, A.Ya. Freidzon, and A.A. Bagaturyants “Symmetry-Breaking in Cationic Polymethine Dyes: Part 2. Shape of Electronic Absorption Bands Explained by the Thermal Fluctuations of the Solvent Reaction Field” // *J. Phys. Chem. A* – 2015. – V. 119. – P. 6807-6815.
2. A. Odinokov, A. Freidzon, and A. Bagaturyants “Molecular dynamics simulation of the glass transition in4,4-N,N-dicarbazolylbiphenyl” // *Chem. Phys. Lett.* – 2015. – V. 633. – P. 41-46.
3. Pavel S. Rukin, Alexandra Ya. Freidzon, Andrei V. Scherbinin, Vyacheslav A. Sazhnikov, Alexander A. Bagaturyants, and Michael V. Alfimov ” Vibronic bandshape of the absorption spectra of dibenzoylmethanatoboron difluoride derivatives: analysis based on ab initio calculations” // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2015. – V. 17. – P. 16997-17006.
4. A.A. Safonov, A.A. Bagaturyants, and V.A. Sazhnikov “Fluorescence Spectra of (Dibenzoylmethanato) boron Difluoride Exciplexes with Aromatic Hydrocarbons: A Theoretical Study” // *J. Phys. Chem. A* – 2015. – V. 119. – P. 8182-8187.
5. A.Ya. Freidzon, A.A. Safonov, and A.A. Bagaturyants “Theoretical Study of the Spectral and Charge-Transport Parameters of an Electron-Transporting Material Bis(10-hydroxybenzo[h]qinolinato) beryllium (Bebq2)” // *J. Phys. Chem. C* – 2015. – V. 119. – P. 26817–26827.
6. E. Heifets, E.A. Kotomin, A.A. Bagaturyants, and J. Maier “Ab Initio Study of BiFeO3: Thermodynamic Stability Conditions” // *J. Phys. Chem. Lett.* – 2015. – V. 6. – P. 2847-2851.
7. 8. A.V. Odinokov and A.A. Bagaturyants “Calculation of Electronic Coupling Matrix Elements in 4,4'-Bis(9-Carbazolyl)-Biphenyl Amorphous Material” // *High Energy Chemistry* – 2015. – V. 49. – P. 173-176.
8. A.V. Odinokov and A.A. Bagaturyants “Specific Interactions of Neutral Side Chains of an Adsorbed Protein with the Surface of α‐Quartz and Silica Gel” // *J. Phys. Chem. B* – 2015. – V. 119. – P. 8679−8684.

2014

1. Багатурьянц А.А., Алфимов М.В. "Многомасштабное атомистическое моделирование иерархических наноматериалов для оптических хемосенсоров." // *Российские Haнотexнологии* – 2014. Т. 9. № 1-2, С. 9–24.
2. Рукин П.С., Кащенко П.А., Малявская А.Ю., Багатурьянц А.А., Алфимов М.В. "Экспериментальное и теоретическое исследование взаимодействия летучих аминов с порфиринами цинка." // *Российские Haнотexнологии* – 2014. Т. 9. № 3-4, С. 33-40.
3. Сафонов А.А., Багатурьянц А.А., Сажников В.А. "Структуры и энергии связи комплексов дибензоилметаната дифторида бора с ароматическими углеводородами в основном и возбужденном электронных состояниях. Расчеты методом теории функционала плотности." // *Химия Высоких Энергий*. – 2014. Т. 48. – № 1. – С. 43–48.
4. Safonov, A. A.; Bagaturyants, A. A.; Sazhnikov, V. A., «Structures and binding energies of the (dibenzoylmethanato)boron difluoride complexes with aromatic hydrocarbons in the ground and excited states. Density functional theory calculations» // HIGH ENERGY CHEMISTRY – 2014. – V. 48. - № 1. - P. 24-29.
5. Safonov A.A. and Bagaturyants A.A. "Charge localization and charge transfer in the Bebq2 monomer and dimer" *J. Mol. Mod. –* 2014. V. 20 - No. 8. - P. 2397.
6. Bogdanova M., Belousov S., Valuev I., Zakirov A., Okun M., Shirabaykin D., Chorkov V., Tokar P., Knizhnik A., Potapkin B., Bagaturyants A., Komarova K., Strikhanov M.N., Tishchenko A.A., Nikitenko V.R., Sukharev V.M., Sannikova N.A., Morozov I.V. "Simulation Platform for Multiscale and Multiphysics Modeling of OLEDs." // *Procedia Computer Science* – 2014 V. 29, P. 740–753 (ICCS 2014. 14th International Conference on Computational Science).
7. Romanova K.A., Freidzon A.Ya., Bagaturyants A.A., and Yu.G. Galyametdinov. "Ab Initio Study of Energy Transfer Pathways in Dinuclear Lanthanide Complex of Europium(III) and Terbium(III) Ions." // *J. Phys. Chem. A*, 2014, 118, 11244−11252.

2013

1. A. Bagaturyants , M. Alfimov. “Atomistic Simulation of Hierarchical Nanostructured Materials for Optical Chemical Sensing. Chemical Sensors: Simulation and Modeling.” // V. 4: Optical Sensors. *Edited by G. Korotcenkov. Momentum Press.* – 2013. – Ch. 1. – P. 1–38.
2. Yuriy N. Kononevich, Ivan B. Meshkov, Natalia V. Voronina, Nikolay M. Surin, Viacheslav A. Sazhnikov, Andrei A. Safonov, Alexander A. Bagaturyants, Mikhail V. Alfimov and Aziz M. Muzafarov. “Synthesis and photophysical properties of alkoxysilyl derivatives of dibenzoylmethanatoboron difluoride” // *Heteroatom Chemistry.* – 2013. – V. 24. – P. 271–282.
3. Vladimir Chashchikhin, Elena Rykova, and Alexander Bagaturyants. “Calculations of the Gibbs Free Energy of Adsorption of Some Small Molecules and Amino Acid Decomposition Products on MCM-41 Mesoporous Silica.” // *J. Phys. Chem. Letters.* – 2013. V. 4. – P. 2298−2302.
4. Svetlana Emelyanova, Vladimir Chashchikhin and Alexander Bagaturyants. “Atomistic multiscale simulation of the structure and properties of an amorphous OXD-7 layer” // *Chem. Phys. Lett.* – 2013. – V. 590. – P. 101-105.
5. Viacheslav A. Sazhnikov, Artem A. Khlebunov, Sergey K. Sazonov, Artem I. Vedernikov, Andrei A. Safonov, Alexander A. Bagatur’yants, Lyudmila G. Kuz’mina, Judith A.K. Howard, Sergey P. Gromov, Michael V. Alﬁmov. “Synthesis, structure and spectral properties of 9-diarylamino-substituted acridines.” // *J. Mol. Struct.* – 2013. – V. 1053. – P. 79–88.

2012

1. Романова К.А., Фрейдзон А.Я., Багатурьянц А.А., Стрелков М.В., Галяметдинов Ю.Г. «[Квантово-химическое моделирование возбужденных состояний некоторых комплексов лантаноидов (III)](http://elibrary.ru/item.asp?id=18189345)» // [*Вестник Казанского технологического университета*](http://elibrary.ru/contents.asp?issueid=1068596)*.* - 2012. - Т. 15. - [№ 18](http://elibrary.ru/contents.asp?issueid=1068596&selid=18189345). - С. 19-22.
2. V. Chashchikhin, E. Rykova, A. Scherbinin, A. Bagaturyants and M. Alfimov. «DFT modeling of band shifts and widths in the absorption spectrum of a 9-(diphenylamino)acridine/silica receptor center upon its interaction with gas-phase NH3, C2H5OH, and (CH3)2CO molecules.» // *Int. J. Quant. Chem.* – 2012. - Vol. 112. – p. 3110–3118.
3. A. Ya. Freidzon, A. A. Safonov, A. A. Bagaturyants, M. V. Alfimov. «Solvatofluorochromism and Twisted Intramolecular Charge-Transfer State of the Nile Red Dye» // *Int. J. Quant. Chem.* – 2012. - Vol. 112. - p. 3059–3067.
4. A. Freidzon, V. Tikhomirov, A. Odinokov, A. Bagaturyants. «Multiscale Approach to the Structure and Spectra of Nile Red Adsorbed on Polystyrene Nanoparticles» // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* – 2012. - V. 38. - p. 012036.

2011

1. К.Г. Владимирова, А.А. Ващенко, О.В. Котова, Л.С. Лепнев, А.А. Багатурьянц, А.Г. Витухновский, В.Г. Назин, Л.Л. Лев, В.А. Рогалев, Исследование электронной структуры комплексов алюминия и цинка с органическими лигандами методами квантовой химии и фотоэлектронной спектроскопии, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2011, № 1, 15–20.
2. С.Н. Дмитриева, М.В. Чуракова, Н.А. Курчавов, А.И. Ведерников, А.Я. Фрейдзон, А.А. Багатурьянц, С.П. Громов, Нитропроизводные N-алкилбензоаза-18-краун-6-эфиров: синтез и комплексообразующие свойства, Журн. орг. химии, 2011, T. 47, № 7, С. 1081–1094.
3. A.Ya. Freidzon, A.A. Bagatur’yants, E.N. Ushakov, S.P. Gromov, M.V. Alfimov, Ab Initio Study of the Structure, Spectral, Ionochromic, and Fluorochromic Properties of Benzoazacrown-Containing Dyes as Potential Optical Molecular Sensors, International Journal of Quantum Chemistry, 2011, vol. 111, 2011, vol. 111, no. 11, 2649–2662.
4. В.С. Чащихин, Е.А. Рыкова, А.А. Багатурьянц, Влияние молекул аналитов на электронные спектры поглощения и флуоресценции рецепторного центра на основе красителя 9-(дифениламино)акридина, адсорбированного на силикагельных кластерах, *Российские нанотехнологии.* 2011. Т. 6. № 9–10. 79–84.
5. А.А. Сафонов, А.А. Багатурьянц, В.А. Сажников, М.В. Алфимов, Расчеты методом теории функционала плотности флуоресцентного индикатора 9-дифениламиноакридина и его взаимодействий с молекулами аналитов. I. Структуры комплексов в основном состоянии и спектры поглощения, *Химия высоких энергий*, 2011, том 45, № 3, 260–267.
6. А.А. Сафонов, А.А. Багатурьянц, В.А. Сажников, М.В. Алфимов, Расчеты методом теории функционала плотности флуоресцентного индикатора 9-дифениламиноакридина и его взаимодействий с молекулами аналитов. II. Структуры комплексов в возбужденном состоянии и спектры испускания, *Химия высоких энергий*, 2011, том 45, № 4, 297–304.
7. В.А. Сажников, В.М. Аристархов, А.Г. А.А. Сафонов, А.А. Багатурьянц, Мирочник, Е.В. Федоренко, М.В. Алфимов. Спектры флуоресценции и структура мономеров и димеров дибензоилметаната дифторида бора, адсорбированного на силикагеле. *Химия высоких энергий*. 2011. Т. 45.№ 4. С. 347-351.
8. Дмитриева С. Н., Чуракова М. В., Курчавов Н. А., Ведерников А. И., Фрейдзон А. Я., Басок С. С., Багатурьянц А. А., Стреленко Ю. А., Громов С. П. “Синтез и комплексы “гость-хозяин” нитропроизводных *N*-алкилбензоаза-18-краун-6-эфиров.” // *Журн. орган. хим*. - 2011. - Т. 47. - №. 7. – С. 1081–1094.
9. К.Г. Владимирова, А.А. Ващенко, О.В. Котова, Л.С. Лепнев, А.А. Багатурьянц, А.Г. Витухновский, В.Г. Назин, Л.Л. Лев, В.А. Рогалев, Исследование электронной структуры комплексов алюминия и цинка с органическими лигандами методами квантовой химии и фотоэлектронной спектроскопии, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2011, № 1, 15–20.
10. В.А. Тихомиров, А.В. Одиноков, А.А. Багатурьянц, М.В. Алфимов, Моделирование поверхности полистирола и адсорбции молекулы красителя на этой поверхности, *Теоретическая и экспериментальная химия*, 2010, том 46, № 3, 333–339.
11. Freidzon A. Ya., Bagatur'yants A. A., Ushakov E. N., Gromov S. P., Alfimov M. V. “*Ab Initio* Study of the Structure, Spectral, Ionochromic, and Fluorochromic Properties of Benzoazacrown-Containing Dyes as Potential Optical Molecular Sensors.” // *Int. J. Quantum Chem. –* 2011. – V. 111. – No. 11. – P. 2649–2662.
12. Dmitrieva S. N., Sidorenko N. I., Kurchavov N. A., Vedernikov A. I., Freidzon A. Ya., Kuz’mina L. G., Buryak A. K., Buslaeva T. M., Bagatur’yants A. A., Strelenko Y. A., Howard J. A. K., Gromov S. P. “Macrocyclic Complexes of Palladium(II) with Benzothiacrown Ethers: Synthesis, Characterization, and Structure of *cis* and *trans* Isomers.” // *Inorg. Chem*. – 2011. - V. 50 - No. 16. - P. 7500–7510.
13. M. V. Basilevsky, E. A. Nikitina, F. V. Grigoriev, A. A. Bagaturyants, M. V. Alfimov, A molecule on the surface or inside a spherical nanoparticle: the computation of the interaction energy in terms of the dielectric continuum model / *STRUCTURAL CHEMISTRY*, 22, 427-432 (2011).
14. A.A. Safonov, E.A. Rykova, A.A. Bagaturyants, V.A. Sazhnikov, M.V. Alfimov, Atomistic simulations of materials for optical chemical sensors: DFT-D calculations of molecular interactions between gas-phase analyte molecules and simple substrate models, *J. Mol. Mod.*, 2011, vol. 17, 1855–1862.
15. V. Chashchikhin, E. Rykova, A. Bagaturyants, Density Functional Theory Modeling of the Adsorption of Small Analyte and Indicator Dye 9-N-Diphenylaminoacridine Molecules on the Surface of Amorphous Silica Nanoparticles, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, vol. 13, 1440–1447.
16. A.Ya. Freidzon, A.V. Scherbinin, A.A. Bagaturyants, M.V. Alfimov, Ab Initio Study of Phosphorescent Emitters Based on Rare-Earth Complexes with Organic Ligands for Organic Electroluminescent Devices, *J. Phys. Chem. A*, 2011, Vol. 115, no. 18, 4565–4573.

2010

1. Ф.В.Григорьев, А.Н.Романов, Д.Н.Лайков, С.Н.Жабин, А.Ю.Головачев, И.Ф.Оферкин. А.В.Сулимов, М.В.Базилевский, А.А.Багатурьянц, В.Б.Сулимов, М.В.Алфимов. «Методы молекулярного моделирования супрамолекулярных комплексов: иерархический подход» // *Pocсийские Нанотехнологии*. (2010) 5, №5-6, 47–53.
2. М.В. Алфимов, А.А. Багатурьянц, А.А. Сафонов, А.В. Щербинин, К. Г. Владимирова, C.А. Белоусов, М.В. Богданова, И.А. Валуев, А.В. Дейнега, Ю.Е. Лозовик, Б. В. Потапкин / Многомасштабный компьютерный дизайн материалов для оптических хемосенсоров на основе фотонных кристаллов // *Российские нанотехнологии* (2010) 5, № 3–4, 84–91.
3. Дмитриева С. Н., Чуракова М. В., Курчавов Н. А., Ведерников А. И., Кузьмина Л. Г., Фрейдзон А. Я., Багатурьянц А. А., Стреленко Ю. А., Ховард Дж. А. К., Громов С. П. Нитропроизводные *N*-алкилбензоаза-15-краун-5-эфиров: синтез, строение и комплексообразование с катионами металлов и аммония.” // *Изв. АН, Сер. хим*. - 2010. - № 6. – С. 1167-1181.
4. В.А. Тихомиров, А.В. Одиноков, А.А. Багатурьянц, М.В. Алфимов «Моделирование поверхности полистирола и адсорбции молекулы красителя на этой поверхности» // *Теоретическая и экспериментальная химия*, 2010. Т. 46. № 6, С. 333–339.
5. D.I. Bazhanov, I.V. Mutigullin, A.A. Knizhnik, B.V. Potapkin, A.A. Bagaturyants, L.R.C. Fonseca, M.W. Stoker, Impact of strain on the surface properties of transition metal carbide films: first-principles study // *J. Appl. Phys.*, 107 (2010) 083521.