

Список научных работ
Лаборатории Молекулярной Динамики и Структуры
Института Химической Кинетики и Горения, Новосибирск за 2009-2014 г.

1. Kim, A.V., Medvedev, N.N., A. Geiger. Molecular dynamics study of the volumetric and hydrophobic properties of the amphiphilic molecule C8E6// *Journal of Molecular Liquids*, 189, pp 74–80, 2014.
2. V.P. Voloshin, N.N. Medvedev, and A.Geiger. Fast Calculation of the Empty Volume in Molecular Systems by the use of Voronoi-Delaunay Subsimplexes // *Trans. on Comput. Sci. XXII, LNCS 8360*, p.156, 2014.
3. A.V. Anikeenko, N.N. Medvedev, N.F. Uvarov, Molecular dynamics study of ion migration mechanism in rubidium nitrate// *Solid State Ionics*, 251, 13-17, 2013.
4. Kim, A.V., Voloshin, V.P., Medvedev, N.N., A. Geiger. "Decomposition of a protein solution into Voronoi shells and Delaunay layers: calculation of the volumetric properties". *Transactions on Computational Science XX* , Springer, Volume 8110, pp 56-71, 2013.
5. Медведев Н.Н, Волошин В.П., Ким А.В., Аникеенко А.В., Гайгер А. Расчет парциального мольного объема и его составляющих на молекулярно-динамических моделях разбавленных растворов.// *Журнал Структурной Химии*, 2013, Том 54 (Приложение№2), S276-S297.
6. А.С. Роик, А.В.Аникеенко, Н.Н.Медведев. Политетраэдрический порядок и локальное химическое упорядочение в металлических расплавах. // *Журнал Структурной Химии*, 2013, Том 54 (2), 269-277
7. Kim, A.V., Voloshin, V.P., Medvedev, N.N., Geiger, A. "Decomposition of a Protein Solution into Voronoi Shells and Delaunay Layers". *Proceedings of the International Symposium on Voronoi Diagrams in Science and Engineering (ISVD-2012)*, New Brunswick, Rutgers University, New Jersey, USA. June 27- 29 2012, ISBN: 978-1-4673-1910-2, pp. 95-102.
8. V.P. Voloshin, N.N. Medvedev, M.N. Andrews, R.R. Burri, R. Winter, A. Geiger, Volumetric Properties of Hydrated Peptides: Voronoi-Delaunay Analysis of Molecular Simulation Runs, *J. Phys. Chem. B*, 2011, 115 (48), pp 14217–14228.
9. Yu.I. Naberukhin, V.P. Voloshin. Structure of ice Ih and ice Ic as described in the language of Delaunay simplices. *Acta Crystallographica Section A*. 2011, A67, 507–511.
10. A.S. Roik, A.V. Anikeenko, N.N. Medvedev, Investigation of the particular features of the structure factor of liquid Al-based alloys, *Journal of Molecular Liquids*, Volume 161, Issue 2, pp. 78-84, 2011.
11. А.В. Аникеенко, Н.Н. Медведев, О причине высокой плотности жидкого циклогексана, *Журнал структурной химии*, 2011, Том 52, №3, с. 513.
12. А.В. Аникеенко, А.В. Ким, Н.Н. Медведев, Исследование структуры жидких С6-алканов методом молекулярной динамики, *Журнал структурной химии*, Том 51, №6, с. 1127, 2010
13. Ю.Я. Ефимов, О влиянии геометрии водородного мостика на колебательные спектры воды: Трёхпараметрический потенциал водородной связи, *Журнал структурной химии*, Том 51, №3, с. 501-508, 2010
14. А.В. Аникеенко, Н.Н. Медведев, Исследование структуры упаковок твердых сфер вблизи Берналовской плотности, *Журнал структурной химии*, Том 50, №4, с. 787, 2009.
15. А.В. Аникеенко, Н.Н. Медведев, М.К. Ковалев, М.С. Мельгунов, Моделирование диффузии молекул газа в пористых слоях разной структуры, *Журнал структурной химии*, Том 50, №3, с. 425, 2009.