

**СВЕДЕНИЯ  
о ведущей организации**

Полное наименование организации, сокращенное наименование организации	Место нахождения (страна, город)	Почтовый адрес (индекс, город, улица, дом), телефон (при наличии); адрес электронной почты (при наличии), адрес официального сайта в сети "Интернет" (при наличии)
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет», ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет», КемГУ, Кемеровский государственный университет	Россия, г. Кемерово	650000, г. Кемерово, ул. Красная, 6 тел./факс: +7 (3842) 58-38-85 e-mail: rector@kemsu.ru Веб-сайт: <a href="https://kemsu.ru/">https://kemsu.ru/</a>

Список основных публикаций работников ведущей организации за последние 5 лет:

1. Korabel'nikov, D.V. Structural, Elastic, Electronic and Vibrational Properties of a Series of Sulfates from First Principles Calculations / D.V. Korabel'nikov, Yu.N. Zhuravlev // J. Phys. Chem. Solids. – 2018. – V. 119. – P. 114–121.
2. Korabel'nikov, D.V. The Nature of the Chemical Bond in Oxyanionic Crystals Based on QTAIM Topological Analysis of Electron Densities / D.V. Korabel'nikov, Yu.N. Zhuravlev // RSC Advances. – 2019. – V. 9. – P. 12020–12033.
3. Fedorov, I.A. Elastic Properties of the Molecular Crystals of Hydrocarbons from First Principles Calculations / I.A. Fedorov // J. Phys.: Condens. Matter – 2020. – V. 32, N. 8. – P. 085704. .
4. Fedorov, I.A. Study of the Elastic Properties of the Energetic Molecular Crystals Using Density Functionals with Van der Waals Corrections / I.A. Fedorov, C.V. Nguyen, A.Y. Prosekov // ACS Omega – 2021. – V. 6, N. 1. – P. 642–648.
5. Basalaev, Y.M. Wannier Functions and Chemical Bonding in Compounds Be–IV–P<sub>2</sub> (IV = C, Si, Ge, Sn) with Chalcopyrite Structure / Y.M. Basalaev, A.B. Gordienko // J. Struct. Chem. – 2021. – V. 62. – P. 817–823.
6. Korabel'nikov, D.V. Compressibility and Electronic Properties of Metal Cyanides / D.V. Korabel'nikov, I.A. Fedorov, Yu.N. Zhuravlev // Phys. Solid State. - 2021. - V.63. - P. 1021–1027.
7. Zhuravlev, Yu.N. Theoretical Study of the Effect of Pressure on the Structure and Electronic Properties of Metal Carbonates / Yu.N. Zhuravlev, D.V. Korabel'nikov // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. – 2022. – V. 86. – P. 1230–1241.
8. Fedorov, I.A. Study Elastic Properties of the Leucine and Isoleucine from First Principles Calculations / I.A. Fedorov // J. Phys.: Condens. Matter – 2022. – V. 34, N. 14. – Article № 145702.
9. Bogdanov, N.E. The Effect of Hydrostatic Compression on the Crystal Structure of Glycinium phosphite / N.E. Bogdanov, D.V. Korabel'nikov, I.A. Fedorov et al. // Acta Cryst. B. – 2022. – V. 78. – P. 756–762.
10. Korabel'nikov, D.V. Ab Initio Study of the Compressibility and Electronic Properties of a Molecular Organic Crystal C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub> / D.V. Korabel'nikov, I.A. Fedorov // Phys. Solid State. - 2022. - V.64. - P. 1488–1493.
11. Zhuravlev, Yu. Chemical Bonding Effects and Physical Properties of Noncentrosymmetric Hexagonal Fluorocarbonates ABCO<sub>3</sub>F (A: K, Rb, Cs; B: Mg, Ca, Sr, Zn, Cd) / Yu. Zhuravlev,

- V. Atuchin // *Molecules*. – 2022. – V. 27. – Article № 6840.
12. Fedorov, I.A. Ab Initio Study of the Compressibility and Electronic Properties of Crystalline Purine / I.A. Fedorov, D.V. Korabel'nikov // *J. Struct. Chem.* – 2022. – V. 63. – P. 1670–1677.
13. Basalaev, Y.M. The Electronic Structure and Chemical Bonding in  $\text{MgPbP}_2$  / Y.M. Basalaev, A.B. Gordienko // *Phys. Stat. Solid. B.* – 2022. – V. 259. – Article № 2100628.
14. Korabel'nikov, D.V. Pressure-Induced Tuning of Structure and Electronic Properties in Lead-Free Hybrid Halide Perovskite  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{SnI}_3$  for Photovoltaic Solar Cells / D.V. Korabel'nikov, Yu.N. Zhuravlev // *Mater. Sci. Eng. B.* – 2023. – V. 293. – Article № 116468.
15. Korabel'nikov, D.V. Compressibility of Sodium Amide and the Effect of Pressure on its Electronic Properties / D.V. Korabel'nikov, I.A. Fedorov, N.G. Kravchenko et al. // *J. Struct. Chem.* – 2023. – V. 64. – P. 1461–1469.

Первый проректор, д.ф.-м.н., профессор

/ Ю.Н. Журавлев

