

ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения
Российской академии наук

Почтовый адрес 620990 г.Екатеринбург, ул. Первомайская, д. 91
Телефон Телефон: (343) 374-52-19
Адрес электронной почты enyashin@ihim.uran.ru
Адрес сайта организации <http://www.ihim.uran.ru>

В Институте успешно применяются методы квантовой химии и спектроскопии для изучения взаимосвязи состав-структура-свойства конденсированных сред. Лаборатория имени профессора А.Л. Ивановского своими работами в этом направлении завоевала мировое признание. Ее сотрудники под руководством доктора химических наук М.В. Кузнецова изучают электронную структуру и физико-химические свойства веществ, исходя из первых принципов, используя теорию функционала электронной плотности.

Список публикаций сотрудников ведущей организации, наиболее близких к тематике диссертационного исследования, приведен ниже:

1. M.N. Kozlova, A.N. Enyashin, E.D. Grayfer, V.A. Kuznetsov, P.E. Plyusnin, N.A. Nebogatikova, V.I. Zaikovskii, V.E. Fedorov / A DFT study and experimental evidence of the sonication-induced cleavage of molybdenum sulfide Mo_2S_3 in liquids // *Journal of Material Chemistry C*. – 2017. – V. 5. – P. 6601–6610.

2. E.V. Anikina, I.A. Balyakin, V.P. Beskachko / Importance of Atomic-Like Basis Set Optimization for DFT Modelling of Nanomaterials // *South Ural State University Bulletin: Mathematics. Mechanics. Physics*. – 2019. – V. 11. – P. 44–50.

3. S.A. Dalmatova, A.D. Fedorenko, L.N. Mazalov, I.P. Asanov, A.Yu. Ledneva, M.S. Tarasenko, A.N. Enyashin, V.I. Zaikovskii, V.E. Fedorov / XPS experimental and DFT investigations on solid solutions of $\text{Mo}_{1-x}\text{Re}_x\text{S}_2$ ($0 < x < 0.20$) // *Nanoscale*. – 2018. – V. 10. – P. 10232–10240.

4. А.Г. Краснов, И.Р. Шеин, И.В. Пийр / Экспериментальное исследование и *ab initio* расчет свойств Sc-, In-допированных титанатов висмута со структурой типа пирохлора // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т.59. – № 3. – С. 483–490.

5. I.S. Popov, A.N. Enyashin, A.A. Rempel / Size dependent content of structural vacancies within TiO nanoparticles: Quantum-chemical DFTB study // *Superlattices and Microstructures*. – 2018. – V. 113. – P. 459–465.

6. A.V. Serdtsev, S.F. Solodovnikov, N.I. Medvedeva / Sodium diffusion and redox properties of alluaudite $\text{Na}_{2+2x}\text{M}_{2-x}(\text{MoO}_4)_3$ (M=Fe, Co, Ni) from DFT+U study // *Materials Today Communications*. – 2020. – V. 22. – P. 100825.