

Список публикаций д.х.н., профессора Дьячкова П.Н.

1. Kazerovskis J., Piskunov S., Zhukovskii Yu.F., D'yachkov P.N., Bellucci S. Formation of linear Ni nanochains inside carbon nanotubes: Prediction from density functional theory // *Chem. Phys. Lett.* 2013. Vol. 577. P. 92-95.
2. D'yachkov E.P., D'yachkov P.N. Location of Paclitaxel and Poly(ethylene glycol) in Triple Antitumor Complexes with Single-Walled Nanotubes According to the Molecular Docking Method // *Nanosci. and Nanotechnol. Lett.* 2013. Vol. 5. No. 11. P. 1188-1190.
3. Zhukovskii Yu.F., Piskunov S., Kazerovskis J., Makaev D.V., D'yachkov P.N. Comparative Theoretical Analysis of BN Nanotubes Doped with Al, P, Ga, As, In, and Sb // *J. Phys. Chem. C.* 2013. Vol. 117. No. 27. P. 14235-14240.
4. D'yachkov P.N., Zaluev V.A., Kocherga E.Yu., Sadykov N.R. Tight Binding Model of Quantum Conductance of Cumulenic and Polyynic Carbynes // *J. Phys. Chem. C.* 2013. Vol. 117. No 32. P. 16306-16315.
5. D'yachkov P.N., Zaluev V.A. Spin-orbit gaps in carbines // *J. Phys. Chem. C.* 2014. Vol. 118. No 5. P. 2799-2803.
6. Залуев В.А., Дьячков П.Н. Зонные структуры атомных цепочек из элементов групп IV, III-V и II-VI // *Журнал неорганической химии.* 2015. Т. 60. № 12. С. 1641-1649.
7. D'yachkov P.N., Zaluev V.A., Piskunov S.N., Zhukovskii Yu.F. Comparative analysis of the electronic structures of mono- and bi-atomic chains of IV, III-V and II-VI group elements calculated using the DFT LCAO and LACW methods // *RSC Adv.* 2015. Vol. 5. P. 91751-91759.
8. Дьячков П.Н. Электронные свойства и применение нанотрубок. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 3-е изд. (эл.), 2015. 491 с.
9. Дьячков П.Н., Дьячков Е.П. Спин-зависимые зонные структуры нанотрубок // *Журнал неорганической химии.* 2016. Т. 61. № 10. С. 1320-1324.
10. D'yachkov P.N. Linear Augmented Cylindrical Wave Method for Nanotubes Electronic Structure // *Intern. J. Quantum Chem.* 2016. Vol. 116. Iss. 3. P. 174-188.
11. D'yachkov P., Makaev D. Ab Initio Spin-Dependent Band Structures of Carbon Nanotubes // *Intern. J. Quantum Chem.* 2016. Vol. 116. Iss. 4. P. 316-324.
12. Дьячков Е.П., Бочков И.А., Залуев В.А., Дьячков П.Н. Электронные свойства нанотрубок диоксида титана, легированных 4d-металлами // *Журнал неорганической химии.* 2017. Т. 62. № 8. С. 1057-1060.
13. Sadykov N.R., Peshkov D.A., D'yachkov P.N. Combined Effect of External Periodic and Constant Electric Fields on Electron Transport in Carbon Nanotubes and Nanoribbons with Metallic Conductivity // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2017. Vol. 86. No 3. P. 034712(1-7).
14. Bocharov D., Piskunov S., Zhukovskii Yu.F., Spohr E., D'yachkov P.N. First principles modeling of 3d-metal doped three-layer fluorite structured TiO₂ (4,4) nanotube to be used for photocatalytic hydrogen production // *Vacuum.* 2017. Vol. 146. P. 562-569.
15. Дьячков П.Н. Энергии оптических щелей в квазиметаллических углеродных нанотрубках // *Журнал неорганической химии.* 2018. Т. 63. № 1. С. 60-65.
16. D'yachkov P.N., Bochkov I.A. Ab initio band structure of quasi-metallic carbon nanotubes for terahertz applications // *Computer Modelling & New Technologies.* 2018. Vol. 22. No 1. P. 7-19.