

Лаборатория физико-химических методов исследования твердого тела (Ивановский А. Л.)

ноябрь 2004- ноябрь 2005

I. МОНОГРАФИИ

1. Захарова Г.С., Волков В.Л., **Ивановская В.В., Ивановский А.Л.** «Нанотрубки и родственные наноструктуры оксидов металлов» УрО РАН, Екатеринбург, 2005, 261 с.
2. Gubanov V.A., **Ivanovskii A.L.**, Zhukov V.P. “Electronic Structure of Refractory Carbides and Nitrides”, Cambridge University Press, **Second Edition**, 2005, 256 pp.

II. ОБЗОРЫ

1. **Ивановский А.Л.** «Новые слоистые аллотропы углерода и наноструктуры на их основе: моделирование атомного строения, химической связи и электронных свойств» // **Ж. неорганич. химии**. 2005. Т. 50. №9, С.1408-1422.
2. Г.С. Захарова, В.Л. Волков, **В.В. Ивановская, А.Л. Ивановский.** «Нанотрубки и родственные наноструктуры оксидов d-металлов: синтез и моделирование». // **Успехи химии**, 2005, Т. 74, № 7, С. 651-685.
3. Волков В.Л., Захарова Г.С., Волкова Е.Г., **Кузнецов М.В.**, Мурзакаев А.М. Ванадий-оксидные нанотрубки. Материаловедение. 2005. № 1, 40-45.

III. СТАТЬИ В ЗАРУБЕЖНЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** “Structural models and electronic properties of C_3N_4 cage-like molecules” // **Diamond Related Struct.**, 2005. V. 14, Iss. 1. P. 1-5.
2. **Ryzhkov M.V., Ivanovskii A.L.**, Delley B.N. “Electronic structure and geometry optimization of nanoparticles Fe_2C , FeC_2 , Fe_3C , FeC_3 and Fe_2C_2 ” // **Chem. Phys. Lett.**, 2005. V. 404. № 4-6. P. 400-408.
3. **V.V. Ivanovskaya**, N. Ranjan, T. Heine, G. Merino, G. Seifert. «Molecular dynamics study of the mechanical and electronic properties of carbon nanotubes». // **Small**. 2005. V.1, P.399-406.
4. **A.N. Enyashin, I.R. Shein, N.I. Medvedeva, A.L. Ivanovskii.** “Electronic properties of 1T and 2H TaS_2 in crystalline and nanotubular forms” // **Inter. Electr. J. Mol. Design (IEJMD)**. 2005. No 4, p. 316-328. <http://www.biochempress.com>
5. G.P. Shveikin, E.V. Polyakov, **T.A. Denisova**, Grigorov I.G., Shtin A.P. “Hierarchy of sizes and sorption selectivity of ultrafine particles of hydrated titania” // **Int. J. Nanotechnology**, 2005. V. 2, No. 3, P.214-218.
6. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** “Mechanical and electronic properties of C/BN nanocable under tensile deformation” // **Nanotechnology**. 2005. V.16. P. 1304-1310.
7. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** “Atomic and electronic structure of orthoboric (H_3BO_3) and metaboric ($H_3B_3O_6$) acids nanotubes” // **Chem. Phys. Letters**. 2005. V. 411. P. 186 – 191.
8. Kaplan-Ashiri I., Cohen S.R., Gartsman A., Rosentsieg R., **Ivanovskaya V.**, Heine T., Seifert G., Wagner H.D., Tenne R. “Direct tensile tests of individual WS_2 nanotubes” // **Mater. Sci. Forum**, 2005. V. 475-479, pp. 4097-4102.
9. **Enyashin A.N.**, Seifert G. “Structure, stability and electronic properties of TiO_2 nanostructures” // **Physica status solidi (b)**, 2005, V.242, №7, P. 1361-1370.
10. Seifert G., **Enyashin A.N.**, Heine Th. “Hyperdiamond and hyperlonsdaleit: possible crystalline phases of fullerene C_{28} ” // **Physical Review B**, 2005, V.72, № 12, art. 012102-1 - 012102-4.

11. **Yuryeva E.I., Pletnev R.N.,** Skripov A.V. "Electronic structure, chemical binding, and elastic properties of M-H interactions as calculated by Xa-DV method " // **Inter. J. of Quantum Chem.**, 2005, V. 104, N 2, P. 143-147.
12. **N.I. Medvedeva,** Yu.N. Gornostyrev, A.J.Freeman. "Electronic origin of solid solution softening in bcc molybdenum alloys" // **Phys. Rev. Lett.** 2005. V.94, p. 136402-1 – 136402-4.
13. **N.I. Medvedeva,** Yu.N.Gornostyrev, A.J. Freeman. "Solid solution softening in bcc Mo alloys: Effect of transition-metal additions on dislocation structure and mobility " // **Phys. Rev. B.** 2005. V.72, p. 134107-1 – 136402-9.
14. B.V. Slobodin, L.L. Surat, V.G. Zubkov, A.P. Tyutyunnik, I.F. Berger, **M.V. Kuznetsov, L.A. Perelyaeva, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii,** B.V. Shulgin, V.I. Solomonov, G. Svensson, B. Forslund, M.J. Sayagues. "Structural, luminescence and electronic properties of the alkaline metal-strontium cyclotetranavanadates $M_2Sr(VO_3)_4$, (M=Na,K,Rb,Cs)" // **Phys. Rev. B** 2005 V.72, .art. 155205 (1-12).
15. I.O.Utkin, Yu.A.Teterin, V.A.Terehov, **Ryzhkov M.V.,** A.Yu.Teterin, L.Vukchevich. "X-ray spectral studies of the electronic structure of uranyl fluorite UO_2F_2 " // **Nuclear Technology & Radiation Protection**, 2004. V. XIX, № 2. P. 15-23.

IV. СТАТЬИ В ОТЕЧЕСТВЕННЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** «Электронное строение фуллереноподобных наночастиц дисульфидов Ti, Zr, Nb, Mo по данным неэмпирических расчетов» // **Ж. неорганической химии**, 2004. Т.49. Т. 10. С. 1654-1658.
2. **Шейн И.Р., Шейн К.И., Ивановский А.Л.** «Зонная структура нового интерметаллида $ZnCNi_3$ в сравнении со сверхпроводящим $MgCNi_3$ » // **Металлофизика новейшие технологии**, 2004, Т.27, № 9, С.1193-1205.
3. **Шейн И.Р., Ивановский А.Л.** «Влияние решеточных вакансий на зонную структуру тройного оксида $Ag_5Pb_2O_6$ » // **Физика твердого тела**, 2005. Т.47, № 4, С. 577-583.
4. **Еняшин А.Н., Медведева Н.И.,** Медведева Ю.Е., **Ивановский А.Л.** «Магнитные состояния и электронная структура кристаллической и фуллереноподобной форм дихлорида никеля $NiCl_2$ » // **Физика твердого тела**, 2005. Т.47, № 3, С. 509-511.
5. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** «Атомная структура, электронное строение и магнитные свойства неорганических фуллеренов» // **Ж. физ. химии**, 2005, Т. 79, № 6, С. 1085-1090.
6. **Шейн И.Р., Ивановский А.Л.** «Упругие свойства и химическая связь в флюоритоподобных Be_2B , $AlBeB$, $MgBeB$ и $NaBeB$ » // **Ж структур. химии**. 2005. Т.46. № 3. С. 552-554.
7. **Юрьева Э.И.,** Верховский С.В., **Плетнев Р.Н.,** Базуев Г.В. ЯМР ^{63}Cu , ^{139}La и химическая связь в анион-дефицитном перовските $LaCu_{0.81}Ni_{0.19}O_{2.5+d}$ // **Ж. структур. химии**, 2005, т. 46, № 1, с. 63-69.
8. Зайнуллина В.М., Волков В.Л., Подвальная Н.В., **Ивановский А.Л.** «Электронная структура и химическая связь в $K_2V_3O_8$ » // **Ж. структур. химии**, 2005, N. 46, № 2, с. 348-350.
9. **Ивановская В.В.,** Зейферт Г., **Ивановский А.Л.** «Электронное строение наноструктур дисульфида титана: монослой, наноленты, нанотрубки» // **Физика и техника полупроводников**. 2005. Т.39, № 9. с. 1093-1100.
10. **Денисова Т.А.,** Максимова Л.Г., Поляков Е.В., Леонидова О.Н., **Журавлев Н.А.,** Тютюнник А.П., **Кузнецов М.В.** Физико-химическое исследование цианоферратов (II) олова (II) и его водородных и литий-насыщенных форм // **Аналитика и контроль**. 2004. Т. 8, № 4. С. 349-354.
11. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** «Моделирование электронного строения гомологов титано-карбоздрена Ti_8C_{12} » // **Ж. неорганической химии**, 2005, Т.50. № 5. С. 743-746.

12. **Юрьева Э.И., Плетнев Р.Н.** «О фазовом переходе в кубическом ZrH_2 » // Электронный журнал "Исследовано в России", 113, с. 1156 - 1159, 2005г. <http://zhurnal.apelarn.ru/articles/2005/113.pdf>
13. **Еняшин А.Н.,** Зейферт Г., **Ивановский А.Л.** «Электронные и термические свойства нанотубулярных C/BN гетероструктур: нанокабель $(5,5)C@(17,0)BN$ -НТ и пипод $[C_{60}]_n@(17,0)BN$ -НТ». // **Неорган. материалы**, 2005, Т. 41, № 6, С.687-695.
14. **Денисова Т.А.,** Громилов С.А., Байдина И.А., Максимова Л.Г., Леонидова О.Н., **Журавлев Н.А.** «Кристаллическая структура и термическое поведение нового цианоферрата (III)-нитрата свинца» // **Ж. неорган. химии**. 2005, Т.50. №5. С.830-834.
15. Швейкин Г.П., Штин А.П., Поляков Е.В., **Денисова Т.А.,** Блиновсков Я.Н., Григоров И.Г., Хлебников А.Н. «Иерархия размеров частиц гидроксида циркония, осажденных на поверхность инертного носителя» // **Неорган. материалы**. 2005. Т.41. №5. С.557-563.
16. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** «Структурные дефекты и электронные свойства нанотрубок TiS_2 » // **Неорган. материалы**. 2005. Т.41. № 10. С. 1-6.
17. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Термодинамические свойства и термическая стабильность фаз в системе $Mg-B$ » // **Неорган. материалы**. 2005. Т.41. № 10. С. 1-6.
18. **Шеин И.Р.,** Кожевников В.Л., **Ивановский А.Л.** «Зонная структура, магнитные и упругие свойства перовскитов $SrFeO_3$ и $LaFeO_3$ » // **Физика твердого тела**, 2005. Т.47, № 11, С. 1998-2003.
19. **Шеин И.Р.,** Кожевников В.Л., **Ивановский А.Л.** «Новые ферромагнитные полуметаллы: двойные перовскиты Sr_2FeMO_6 ($M=Sn, Ti, Zr$)» // **Письма в ЖЭТФ**, 2005. Т. 82, № 4, С 239-242.
20. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «О составе нестехиометрических боридов некоторых металлов» // Электронный журнал "Исследовано в России", 2005. 147. С. 1544-1549. <http://zhurnal.apelarn.ru/articles/2005/147.pdf>.
21. Вотяков С.Л., Щапова Ю.В., Поротников А.А., Галахова О.Л., **Ивановский А.Л.** «Мессбауэровское исследование ионов железа и *ab initio* кластерное моделирование локальной атомной и электронной структуры природных шпинелей $(Fe,Mg)(Cr,Al,Fe)_2O_4$ » // **Известия РАН, сер. Физическая**, 2005. Т. 69, № 10, С. 1529-1534.
22. **Юрьева Э.И.,** Щапова Ю.В., Поротников А.А., **Ивановский А.Л.,** Вотяков С.Л. «Моделирование параметров Мессбауэровских спектров ионов Fe^{3+} в хромшпинелидах переменного состава X_{α} -методом ДВ» // **Известия РАН, сер. Физическая**, 2005. Т. 69, № 10, С. 1418-1421.
23. **Медведева Н.И.,** Финкельштейн Л.Д., Шамин С.Н., Ляховская И.И., Курмаев Э.З., «Химические сдвиги рентгеновских эмиссионных спектров MgB_2 и их корреляция с электронной структурой» // **Физика твердого тела**. 2004. Т.46. № 11. С.1930-1933.
24. **Плетнев Р.Н.,** Кийко В.С., Макурин Ю.Н., Непряхин А.А. «Протонный магнитный резонанс и состояние водорода в гидроксиде бериллия» // **Новые огнеупоры**, 2005, N7, С.39-41.
25. Бузлуков А.А., Долуханян С.К., **Плетнев Р.Н.,** Скрипов А.В. Спин-решеточная релаксация ядер $1H$ и $2D$ в дигидридах и дидейтеридах циркония и титана // **Изв. РАН, сер. физич.** 2005. Т.69. N7. С.945-947.
26. **Банников В.В.,** Митрофанов В.Я. «Особенности двойного обмена в кубических кристаллах, содержащих обменно-связанные пары $3d^3-3d^4$ ионов смешанной валентности». // **Физика твердого тела**, 2005. Т. 47. № 8. С. 1474-1476.
27. Вятчина В.Г., **Переляева Л.А.,** Зуев М.Г., **Бакланова И.В.,** Мамошин В.Л. Колебательные спектры стекол в конденсированных сульфатоборатных системах // **Неорган. материалы**. 2005. Т. 41. №10. С.
28. Волков В.Л., Захарова Г.С., Волкова Е.Г., **Кузнецов М.В.** «Нанотрубки сложного оксида ванадия и молибдена». // **ЖНХ**. 2005. Т. 50. № 3. С. 373-377.
29. О.В. Бушкова, О.Л. Андреев, Н.Н. Баталов, С.Н. Шкерин, **М.В.Кузнецов**, А.П. Тютюнник, О.В. Корякова, Е.Н. Song, Н.Н. Chung, «Химические взаимодействия в

катодном полуэлементе литий-ионных аккумуляторов» // **Электрохимическая энергетика**. 2005, Т.5, №2, С.74-84.

30. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Стандартные энтальпии образования родственных соединений в системах металл-бор» // **Известия Челябинского НЦ**. 2005, вып. 3 (29) с. 5-9.
31. Громилов С.А., Байдина И.А., **Денисова Т.А.**, Максимова Л.Г. «Кристаллическая структура $\text{Pb}_2[\text{Fe}(\text{CN})_6]\cdot\text{NO}_3\cdot 5.5\text{H}_2\text{O}$ » // **Ж. структ. химии**, 2005, Т. 46, № 1, с. 118-123.
32. Ю.Г. Ятлук, **Н.А. Журавлев**, О.В. Корякова, Л.К. Неудачина, Ю.А. Скорик «Новые гибридные хелатные сорбенты с привитыми β -аминопропионатными группами на основе смешанных оксидов кремния, алюминия титана или циркония» // **Изв. РАН. Сер. хим.**, 2005. № 8, с.1783-1788.
33. Строщков В.П., **Кузнецов М.В.**, Кожевников В.Л., Пшеничников В.А. «Влияние электрохимической размерной обработки на состав поверхностных слоев инструментальных сталей». // **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования**, 2005, №10, с.68-76.
34. Строщков В.П., **Кузнецов М.В.**, Кожевников В.Л., Пшеничников В.А. «Исследование поверхности инструментальных сталей методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии до и после электрохимической размерной обработки». // **Физика и химия обработки материалов**. 2005, №3, с.85-91.
35. Кийко В.С., **Плетнев Р.Н.** Макурин Ю.Н., Непряхин А.А. «Состояние водорода в продуктах термического разложения» // **Огнеупоры и техническая керамика**, 2005, № 7, С. 19-21.

+++++ 01 ноября 2005 +++++

36. Тетерин Ю.А., Маслаков К.И., **Рыжков М.В.**, Трапарич О.А., Вукчевич Л., Тетерин А.Ю., Панов А.Д. «Природа химической связи в диоксиде урана UO_2 » // **Радиохимия**, 2005, Т.47, №3, с.215-224.
37. Уткин И.О., Тетерин Ю.А., Терехов В.А., **Рыжков М.В.**, Тетерин А.Ю., Вукчевич Л. «Рентгеноспектральное исследование электронной структуры уранил фторида UO_2F_2 » // **Радиохимия**, 2005, Т.47, №4, с.334-344.

V. ПАТЕНТЫ

VI. НЕРЕЦЕНЗИРУЕМЫЕ ИЗДАНИЯ (СБОРНИКИ И ПРОЧ.)

1. **I.R. Shein, N.I. Medvedeva, A.L. Ivanovskii** "Electronic band structure of silver-deficient hexagonal AgB_2 " // **Cond-mat/04-12426** (2004).
2. Щапова Ю.В., Вотяков С.Л., **Ивановский А.Л.**. Методические аспекты квантово-химического моделирования электронного строения циркона и кварца как продукта его радиационной метамиктизации // **Ежегодник ИГГ УрО РАН**. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2004. С.296-306.
3. **Shein I.R.**, Kozhevnikov V.L., **Ivanovskii A.L.** "First-principles study of cubic perovskites SrMO_3 ($\text{M} = \text{Ti, V, Zr and Nb}$)" // **Cond-mat/05-04286** (2005).
4. **Enyashin A.N., Shein I.R., Medvedeva N.I., Ivanovskii A.L.** "Electronic band structure of 1T and 2H TaS_2 nanotubes" In: **Physics of Electronic Materials**, 2nd Intern. Conf. **Proceedings**. Kaluga, Russia, 2005. V.2, p. 182-183.
5. **Enyashin A.N.**, Seifert G., **Ivanovskii A.L.** "Stability and electronic properties of quasi-one-dimensional TiO_2 nanostructures" // **Ibid.**, V. 2. p. 179-180.
6. **Ivanovskaya V.V.**, Ranjan N., Heine T., Merino G., Seifert G., **Ivanovskii A.L.** "Molecular dynamics study of the mechanical and electronic properties of carbon nanotubes" // **Ibid.** V.2., p. 176-179.
7. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** "Structural and electronic properties of nano-peapods: endohedral metallofullerenes $\text{Ti}_2\text{@C}_{80}$ inside single-walled carbon nanotube" // **Ibid.** V.2. p. 98-100.

8. **Shein K.I., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** "Atomic relaxation effects and electronic properties of the (100) and (110) Nb surfaces" // **Ibid.**, V.1, p. 190-192.
9. **Shein I.R., Medvedeva N.I., Ivanovskii A.L.** "Electronic properties of complete and cation-deficient silver diborides" // **Ibid.**, V. 1, p. 102-103.
10. **Yuryeva E.I., Pletnev R.N.** "Peculiarities of chemical binding in metal-hydrogen systems, M-H (M= Mn, Co), calculated by X α -DV method // **Ibid.**, V.1. P. 82-83.
11. **Yuryeva E.I.** "The 3C-SiC(B,N) pairwise defect creation as calculated by X α -DV method " // **Ibid.**, V.1. P. 143.
12. **Bannikov V.V.** "Spin heat capacity of magneto-diluted crystals with mixed valence pair centers" // **Ibid.**, V.1. P. 117-120.
13. **Юрьева Э.И.** Квантово-химические подходы к описанию процессов ионной проводимости в твердых электролитах // **Фундаментальные проблемы электрохимической энергетики. Материалы VI Международной конференции. 5-9 сентября 2005 года. Г. Саратов. Издательство Саратовского университета. 2005. С.434-436.**
14. Вятчина В.Г., **Переляева Л.А.**, Зуев М.Г., **Бакланова И.В.**, Мамошин В.Л. Легкоплавкие стекла систем RSO₄ – Na₂B₄O₇ – KPO₃ и RSO₄ – Na₂B₄O₇ – K₂SO₄ (R=Mg, Ca, Sr, Ba): синтез и спектроскопия // **Химия - XXI век: новые технологии, новые продукты. Сборник трудов VIII международной научно-практической конференции. 10-12 мая. 2005. Г. Кемерово. С. 145-148.**
15. **Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, **Н.А. Журавлев**, О.Н. Леонидова, Г.Ш. Шехтман, Е.В. Поляков // Роль молекулярной сорбции в формировании проводящих свойств в системе (Sn, Pb)_xFe(CN)₆+LiCl. Сборник трудов 8-го Международного симпозиума «Фазовые превращения в твёрдых растворах и сплавах», ОМА-2005, Часть I, 12-16 сентября 2005г., г.Сочи. С.118-121.
16. Д.Г. Келлерман, С.П. Габуда, **Н.А. Журавлев**, А.С. Семенова, **Т.А. Денисова**, **Р.Н. Плетнев** // Исследование дефектов в Li_{1-x}CoO₂ методом ядерного магнитного резонанса. Сборник трудов 8-го Международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов», ODPO-2005, Часть II, 19-22 сентября 2005г., г.Сочи. С.113-116.
17. **Кузнецов М.В., Шеин К.И., Шалаева Е.В.** // Методы исследования поверхности твердых тел: состав, структура, химическая связь. Сборник трудов 8-го Международного симпозиума «Упорядочение в металлах и сплавах», ОМА-2005, Часть I, 12-16 сентября 2005г., г.Сочи. С.200-204.
18. Волков В.Л., Захарова Г.С., Переляева Л.А., **Кузнецов М.В.** Наноккомпозиты поливинилового спирта, пирокатехина и гидрохинона с ксерогелем V₂O₅·nH₂O. ОМА-2005. Сочи. 74-75.
19. Волков В.Л., Захарова Г.С., Волкова Е.Г., **Кузнецов М.В.**, Мурзакаев А.М. Наноструктуры сложного оксида ванадия и молибдена. ODPO-2005. Сочи. 126-127.
20. **Юрьева Э.И.**, Юрьев Е.А., **Плетнев Р.Н.** Роль X α -ДВ обменно-корреляционных поправок в расчетах полной энергии молекулы H₂O // ОМА-2005, Часть II, 12-16 сентября 2005г., г. Сочи. С.207-209.

VII. ТЕЗИСЫ

1. **Yuryeva E.I.** "The investigation of crystal stability by X α -DVM reduced binding energy calculation" // **Book of Abstracts of the 9-th V.A.Fock Meeting on Quantum and Computational Chemistry incorporating 2-nd Hans Hellmann Symposium on Theoretical Chemistry "DFT:Complex Systems and Complex Problems", Velikiy Novgorod, 2005, p.55.**
2. **Yuryeva E.I.** "Quantum chemical modelling of electronic processes in defect and complex SrFeO_{3-x} // **Ibid.**, p.47.
3. G. Seifert, **V. Ivanovskaya**, N. Ranjan, T.Heine. P. "Molecular Dynamics Simulations of the mechanical and electronic properties of nanotubes" // **In: 6th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, NT05, June, 2005, Gothenburg, Sweden. P. 26.**

4. I. Kaplan-Ashiri, S.R. Cohen, K. Gartsman, **V. Ivanovskaya**, T. Heine, G. Seifert, H.D. Wagner, R. Tenne. "Direct Tensile Tests and buckling of WS₂ Nanotubes" // **Ibid.**, P.275.
5. I. Kaplan-Ashiri, S.R. Cohen, K. Gartsman, **V. Ivanovskaya**, T. Heine, G. Seifert, I. Kanevsky, H.D. Wagner, R. Tenne. "Direct Tensile Tests of Individual WS₂ Nanotubes". // In: **NanoteC05, Nanotechnology in Carbon and Related Materials, 31 August - 3 September 2005, Sussex, Brighton, UK.**
6. **Enyashin A.**, Gemming S., Schreiber M. „Structure and reactivity at metal-semiconductor interfaces” // In: **Ψ_k 2005 Conference, Schwäbisch Gmünd, Germany, 2005.**
7. **Enyashin A.**, Gemming S., Seifert G. “Stability of the MoS₂ Fullerenes: Quantum-chemical view”. // In: **41st Symposium on Theoretical Chemistry, Innsbruck, Austria, 2005.**
8. **Enyashin A.**, Seifert G. “Quantum-chemical simulations of the MoS₂ fullerenes”. // In: **GIF 25th Meeting: Nanotubes and Nanowires, IFW Dresden, Germany, 2005.**
9. **Шеин И.Р.** Электронные, когезионные свойства и особенности межатомных взаимодействий в катион-дефицитных диборидах 3d-5d-металлов // Тезисы докладов Пятого семинара СО РАН - УрО РАН "Термодинамика и материаловедение", 26 - 28 сентября 2005г., Новосибирск. - С. 227.
10. **Шеин К.И., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** Влияние примеси кремния на электронную структуру и когезионную энергию нитрида титана // **Ibid.**, с. 226.
11. **Шеин И.Р.,** Кожевников В.Л., **Ивановский А.Л.** Влияние кислородных вакансий на электронную структуру кубического перовскита SrFeO_{3-x} // **Ibid.**, с. 225.
12. **Рыжков М.В., Ивановский А.Л.** Теоретические исследования взаимодействия атомов железа и углерода в различных изомерах наночастиц Fe₂C, FeC₂, Fe₃C, FeC₃, Fe₂C₂ и Fe₂C₃ // **Ibid.**, с. 206.
13. **Ивановская В.В.,** Зайферт Г., **Ивановский А.Л.** Зонная структура допированных ниобием нанотрубок MoS₂ // **Ibid.**, с. 185.
14. **Ивановская В.В.,** Зайферт Г., **Ивановский А.Л.** Моделирование механических свойств нанотрубок дисульфида молибдена // **Ibid.**, с. 184.
15. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** Моделирование квазиодномерных наноструктур карбидов металлов // **Ibid.**, с. 181.
16. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** Моделирование тубулярных нанокристаллитов оксида магния // **Ibid.**, с. 180.
17. **Еняшин А.Н.,** Зайферт Г., **Ивановский А.Л.** Моделирование структурных, электронных, механических и термических свойств нанокабеля C/BN // **Ibid.**, с. 179.
18. **Юрьева Э.И.** Ха-ДВМ моделирование температурной зависимости параметров 57Fe мессбауэровского спектра А- и В-субъединиц тетрамерного дезоксигемоглобина // **Ibid.**, с. 156.
19. **Шалаева Е.В.,** Прекул А.Ф., Панкратов А.А. Фазовые превращения и дефекты в отожженных квазикристаллообразующих сплавах Al₆₁Cu₂₆Fe₁₃, полученных быстрой закалкой // **Ibid.**, с. 153.
20. **Медведева Н.И.** Электронная структура и магнитные свойства ОЦК и ГЦК железа, их твердых растворов с углеродом и цементита // **Ibid.**, с. 122.
21. Леонидов И.А., **Переляева Л.А., Бакланова И.В.,** Леонидова О.Н., Самигуллина Р.Ф. Влияние дефектов структуры на колебательные спектры витлокитоподобных ванадатов кальция // **Ibid.**, с. 117.
22. Зуев М.Г., **Переляева Л.А.,** Богданов Е.В. ЭФазовые равновесия в системе La₂O₃-Lu₂O₃-SrO в субсолидусной области // **Ibid.**, с. 103.
23. **Денисова Т.А.,** Леонидов И.А., **Журавлев Н.А.,** Леонидова О.Н., **Бакланова Я.В.,** Самигуллина Р.Ф. ЯМР ⁷Li в твердых электролитах Li_{2x}Zn_{2-3x}Ti_{1+x}O₄ (0.33<x<0.67) // 5-й семинар СО РАН – УрО РАН. Термодинамика и материаловедение. Тез. докл. Новосибирск. 2005. С. 97.
24. Волков В.Л., Захарова Г.С., Волкова Е.Г., **Кузнецов М.В.,** Мурзакаев А.М. Нанотубулены оксида ванадия, легированные титаном и молибденом // **Ibid.**, с. 89.
25. **Юрьева Э.И.,** Леонидов И.А. Ха-ДВМ расчеты химпотенциала в условиях диффузии кислорода для структур иттрий-бариевого купрата YBa₂Cu₃O_{7-d} и кубического перовскита SrFeO₃ // **Ibid.**, с. 76.

26. **Банников В.В.**, Митрофанов В.Я. Особенности диффузии ионов кислорода в соединении NiO_{1-x} // **Ibid.**, с. 14.
27. **Банников В.В.** Низкотемпературная теплоемкость магниторазбавленных ионных кристаллов, содержащих комплексы смешанной валентности // **Ibid.**, с. 13.
28. **Yuryeva E.I.**, M.I. Oshtrakh *AB initio* study of the ^{57}Fe quadrupole splitting in the heme models of α - and β -subunits in tetrameric deoxyhemoglobin // **Intern. Conf. on the Applications of the Mossbauer Effect**. Abstracts. September 5-9, 2005. Montpellier, France. T2-P10.
29. **Bannikov V.V.**, Mitrofanov V.Ya. "The features of exchange interactions and spin ordering in mixed valence impurity pairs in diamagnetic crystals". // **3-rd Moscow Intern. Symp. on Magnetism (MISM2005)**. Moscow, 2005, June 25-30.
30. Поляков Е.В., Максимова Л.Г., Леонидова О.Н., **Денисова Т.А.**, **Журавлев Н.А.**, Блиновсков Я.Н., **Корякова О.В.**, Хлебников Н.А., Слободин Б.В. Влияние молекулярной сорбции на проводимость твердых фаз в системе $\text{Cs}_{2-x}\text{Ni}[\text{Fe}(\text{CN})_6] \cdot y\text{Cs}_2\text{CO}_3$ // **V Международная научная конференция «Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии»** 18-23 сентября 2005г., Кисловодск. Кисловодск-Ставрополь: СевКавГТУ, 2005. С.27-28.
31. Поляков Е.В., Максимова Л.Г., Леонидова О.Н., **Денисова Т.А.**, **Журавлев Н.А.**, Блиновсков Я.Н., Суриков В.Т., Хлебников Н.А. Ионная проводимость цианоферратов никеля-цезия как результат молекулярной сорбции карбоната цезия // **5-й семинар СО РАН – УрО РАН. Термодинамика и материаловедение**. Тез. докл. Новосибирск. 2005. С. 203.
32. **E.Shalaeva**, A. Prekul, R. Martin. Defects in the structure of icosahedral phase in rapidly quenched quasicrystal-forming alloys $\text{Al}_{61}\text{Cu}_{26}\text{Fe}_{13}$ subjected to annealing // **Inter. Conf. on Quasicrystals - ICQ 9**, 22-26 May 2005, Iowa State University, ICQ 9 Abstracts /icq9.ameslab.gov/AbstractsA-Z.html#opq.
33. **O.V.Koryakova**, **N.A.Zhuravlev**, V.G.Kharchuk, M.Yu.Yanchenko, L.A.Buldakova, Yu.V.Mikushina «Study of mixed gels titanium oxid – silicady physical-chemical methods» // Печ. Physical-chemical foundation of high technologies of XXIst century. Тезисы докладов международной конференции. С.111.
34. **N.I. Medvedeva**, Y.N. Gornostyrev, Freeman A.J. " Alloying effect on screw dislocation structure in Mo: large-scale model with ab-initio parametrization ". American Physical Society Meeting, March 21-25, 2005, Los Angeles, USA, P.877.
35. **N.I. Medvedeva**, O.Y. Kontsevovii, A.J. Freeman " First-principle study of the impurity effect on the electronic structure and stability of A15 chromium phase ". American Physical Society Meeting, March 21-25, 2005. Los Angeles, USA, P.878-879.
36. А.Б.Ярославцев, И.А.Стенина, И.Ю.Пинус, **Н.А.Журавлев** «Фазовые превращения в двойных фосфатах поливалентных элементов» // **5-й семинар СО РАН – УрО РАН. Термодинамика и материаловедение**. Тез. докл. Новосибирск. 2005. С. 77.
37. В.С. Кийко, Е.Г. Иванова, Н.Н. Востряков, А.А. Софронов, Макурин Ю.Н., Комоликов Ю.И., **Ивановский А.Л.** «Скорость и поглощение ультразвука в оксидной керамике» // «Химия твердого тела и современные микро-и нанотехнологии». Материалы V международной конференции. Кисловодск-Ставрополь. Сев. Кав. ГТУ. 18-23 сент. 2005. С. 33.
38. Кийко В.С., Софронов А.А., Макурин Ю.Н., Шабунин С.Н., Плетнева Е.Д., **Ивановский А.Л.** Применение керамики $\text{BeO}+\text{TiO}_2$ в различных областях техники и специального приборостроения// там же, С. 34.
39. Вятчина В.Г., **Переляева Л.А.**, Зуев М.Г., Мамошин В.Л., **Бакланова И.В.** «Легкоплавкие стекла систем $\text{RSO}_4 - \text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 - \text{KPO}_3$ и $\text{RSO}_4 - \text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 - \text{K}_2\text{SO}_4$ ($\text{R}=\text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$): синтез и спектроскопия». // Сборник трудов VIII международной научно-практической конференции "Химия - XXI век: новые технологии, новые продукты". 10 -12 мая, Кемерово, 2005. с. 145-148.