

**Лаборатория КВАНТОВОЙ ХИМИИ И СПЕКТРОСКОПИИ
(Ивановский А. Л.)**

ноябрь 2006- ноябрь 2007

I. МОНОГРАФИИ

1. Кийко В.С., Макурин Ю.Н., **Ивановский А.Л.** «Керамика на основе оксида бериллия. Получение, физико-химические свойства и применение». Изд-во УрО РАН, Екатеринбург, 2006, 440 с.
2. **E.I. Yuryeva**, S.P. Gabuda and **R.N. Pletnev**, "Quantum Chemistry and Nuclear Resonance Spectroscopy Data in Natural and Synthetic Nanotechnological Materials with *nd*-Metal Atoms Participations," New-York: Nova Science Publishers, Inc. 2007. - 84 p. ISBN: 1-60021-748-6.

II. ОБЗОРЫ

1. **А.Л. Ивановский.** «Нанокарбиды титана: синтез и моделирование» // **Теор. exper. химия**, 2007. Т. 43, № 1, С. 1-23.
2. **А.Л. Ивановский.** «Намагничивание немагнитных *sp* материалов в присутствии *sp* примесей и дефектов» // **Успехи физических наук**, 2007, Т. 177, № 10, с. 1083-1105.
3. **А.Л. Ивановский.** «Магнетизм немагнитных нанотрубок, индуцированный немагнитными *sp* примесями и структурными дефектами» // **Российские нанотехнологии**, 2007, Т. 2, № 7-8, с.83-91.
4. **Enyashin A.N.**, Gemming S., Seifert G. «Simulation of Inorganic Nanotubes» // Chapter in «**Materials for Tomorrow: Theory, Experiments and Modelling**», Springer Series in Materials Science, Vol. 93, Ed. S. Gemming, M. Schreiber, J.-B. Suck, P. 33-57.
5. **E.I. Yuryeva**, S.P. Gabuda and **R.N. Pletnev**, "Quantum Chemistry and Nuclear Resonance Spectroscopy Data in Natural and Synthetic Nanotechnological Materials with *nd*-Metal Atoms Participations" // Chapter 9 in "Progress in Quantum Chemistry Research", New York: Nova Science Publishers, Inc., Ed. E.O. Hoffman, 2007, p. 337-420. ISBN: 1-60021-621-8.
6. **В.В. Ивановская, А.Л. Ивановский.** «Алмазоподобные углеродные наноматериалы: моделирование структуры и свойств» // **Российские нанотехнологии**, 2007, Т. 2, № 9-10, с.12-27.

III. СТАТЬИ В ЗАРУБЕЖНЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Shein I.R., Shein K.I., Ivanovskii A.L.** "Thorite versus huttonite: stability, electronic properties and X-ray emission spectra from first principle calculations" // **Phys. Chem. Minerals**, 2006, V. 33, N 8-9, P. 545-552.
2. **Shein I.R., Shein K.I., Ivanovskii A.L.** "First-principles study on the structural, cohesive and electronic properties of rhombohedral Mo₂B₅ as compared with hexagonal MoB₂" // **Physica B: Condensed Matter** 2007. V. 387. Iss. 1-2, P. 184-189.
3. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii**, G. Seifert "Stability and electronic properties of single-walled γ -AlO(OH) nanotubes" // **Mendeleev Communications**, 2006. V. 16, No 6, P. 292-294.
4. **A.N. Enyashin**, S. Gemming, M. Bar-Sadan, R. Popovitz-Biro, S. Y. Hong, Y. Prior, R. Tenne, G. Seifert. "Structure and Stability of Molybdenum Sulfide Fullerenes" // **Angew. Chem. Int. Ed.** 2006, V. 45, P. 1 – 6.
5. M. Bar-Sadan, **A. N. Enyashin**, S. Gemming, R. Popovitz-Biro, S. Y. Hong, Y. Prior, R. Tenne, G. Seifert "Structure and Stability of Molybdenum Sulfide Fullerenes" // **J. Phys. Chem.** 2006, V. B110, No 50, P. 25399-25410.
6. **Shein I.R., Shein K.I., Medvedeva N.I., Ivanovskii A.L.** "Electronic band structure of thorium hydrides: ThH₂ and Th₄H₁₅" **Physica B: Condensed Matter**, 2007, V. 389, Iss. 2, P. 296-301.

7. Tyutyunnik A.P., Zubkov V. G., Tarakina N. V., Krasil'nikov V. N., **Perelyaeva L. A., Baklanova I. V.**, Svensson G. "Synthesis, crystal structure and vibrational spectra of KCrV_2O_7 and RbCrV_2O_7 " // **Solid State Sciences**, 2006. V. 8, Iss. 11, P.1344-1352.
8. **Ivanovskaya V.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** "Structural, elastic and electronic properties of meta-stable diamond-like Ti, Fe and Zn monocarbides: density functional tight binding calculations." // **Diamond and Related Materials**. 2007, V. 16, No 1, P. 243-247.
9. **Bannikov V.V.**, Fishman A.Ya., Leontiev L.I., Mitrofanov V.Ya. "Formation of Diffusion Potential Barrier for Oxygen Ions in $\text{NiO}_{1-\delta}$ Crystal" // **Defect and Diffusion Forum**, 2006, V. 258-260, pp.118-123
10. **V.V. Ivanovskaya**, Ch. Köhler, G. Seifert "3d metal nanowires and clusters inside carbon nanotubes: structural, electronic, and magnetic properties" // **Phys. Rev. B**, 2007. V. 75, Iss. 7, art. 075410 (1-7).
11. **Bannikov V.V. Shein I.R., Ivanovskii A.L.** "Electronic structure, chemical bonding and elastic properties of the first thorium-containing nitride perovskite TaThN_3 " // **Phys. status solidi**, 2007, (RRL) 1, No 3, P. 89-91.
12. **Shein I.R., Shein K.I., Ivanovskii A.L.** "Elastic, electronic properties and stability of SrThO_3 , ThO_2 and SrZrO_3 from first principles" // **J. Nuclear Materials**, 2007. V. 361, No 1, P. 69-77.
13. **Yuryeva E.I.**, Oshtrakh M.I. "Ab initio study of the ^{57}Fe quadrupole splitting in the heme models of α - and β -subunits in tetrameric deoxyhemoglobin" // **Hyperfine interactions**, 2005 (эта статья опубликована только сейчас несмотря на то, что была отправлена в 2005 году, аналогичную ситуацию см. в ссылках 1,3,4,7,9 здесь и 42,43 в списке отечественных журналов ???), 165, Numbers 1-4, P. 327 - 331. Data SpringerLink 22 ноября 2006 г.
14. **Shein I.R. Medvedeva N.I. Ivanovskii A.L.** "Electronic structure and magnetic properties of Fe_3C with 3d and 4d impurities" // **physica status solidi (b)** 2007, V. 244, No 6, P. 1971-1981.
15. **Enyashin A.N., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** "Bending of MgO tubes: a new mechanically-induced hexagonal phase of magnesium oxide" // **Phys. Rev. B**, 2007, V. 75, Iss. 19, art. 193408 (1-4)
16. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** "Functionalization of Carbon Nanotubes by Covalently Fixed Graphite Nanoplatelets: a Theoretical Study" // **Mendelev Communications**, 2007, V.17, № 4, p. 199-201.
17. **Shein I.R., Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** "Magnetization of carbon-doped MgO nanotubes" // **Phys. Rev. B**, 2007, V. 75, Iss. 24, art. 245404 (1-5)
18. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** "The mechanically-induced tuning of structural properties for MgO tubes under uniaxial tension, torsion and bending: computer molecular modeling". // **Nanotechnology**, 2007. V. 18, Iss. 20. art 205707 (5 pp.)
19. **I.R. Shein, K.I. Shein, N.I. Medvedeva, Ivanovskii A.L.** "Electronic structure and stability of thorium carbonitrides" // **Physica status solidi (b)** V. 244, No. 9, P.3198–3205 (2007).
20. **Yuryeva E.I.** "X α -DVM study of properties of active sites of hemoglobin upon substitution of Fe by other 3d-metal" // **International Journal of Quantum Chemistry**, 2007, V. 107, Issue 13, P. 2556 - 2563.
21. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** "Structural, thermal properties and stability of monolithic and hollow MgO nano-cubes: atomistic simulation" // **J. Molecular Struct. - THEOCHEM**, 2007, V.822, No 1, P. 28-32.
22. **Shalaeva E.V.**, Prekul A.F. "Structural transformations in quasicrystal-forming quenched alloys of $\text{Al}_{61}\text{Cu}_{26}\text{Fe}_{13}$ subjected to isothermal annealing" // **Philosophical Magazine**, 2007, V.87, p.2913-2919.
23. M.A. Gorbunova, **I.R. Shein**, Yu.N. Makurin, V.S. Kiiko, **Ivanovskii A.L.** "Electronic and magnetic properties of beryllium oxide with 3d impurities from the first-principles calculations" // **Physica B: Cond. Matter**. 2007, v.400, No 1 p. 47-52.
24. **Enyashin A.N.**, Gemming S., Seifert G. „DNA-wrapped carbon nanotubes“ // **Nanotechnology**, 2007, V.18, art. 245702 (10 pp).

25. Kuc A., **Enyashin A.N.**, Seifert G. „Metal-Organic Frameworks: Structural, Energetic, Electronic, and Mechanical Properties“ // **J. Phys. Chem. B**, 2007, V. 111, № 28, P. 8179 - 8186.
26. **Enyashin A.N.**, Gemming S. “TiSi₂ nanostructures – enhanced conductivity at nanoscale?” // **physica status solidi (b)**, 2007, V. 244, № 10, P. 3593-3600.
27. **I.R. Shein, Ivanovskii A.L.** “First principle prediction of vacancy-induced magnetism in non-magnetic perovskite SrTiO₃” // **Phys. Letters A**, V. 371, P.155-159 (2007).

IV. СТАТЬИ В ОТЕЧЕСТВЕННЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский.** «Атомные дефекты стенок и электронное строение нанотрубок дисульфида молибдена» // **Физика техника полупроводников**, 2007, Т. 41, № 1, С. 82-87.
2. **А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский.** «Атомные механизмы деформаций углеродных и нанотрубок нитрида бора при их изгибе и скручивании» // **Неорган. материалы**. 2006. Т.42. № 12. С.1336-1341.
3. **А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский.** «Атомная структура, стабильность и электронное строение икосаэдрических нано-алмазов и онионов» // **Физика твердого тела**, 2007. Т. 49, № 2, С. 378-383.
4. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Состав и агрегатное состояние конденсированной среды, образующейся при нагревании оксида Bi₂O₃ в аргоне: компьютерный эксперимент». // **Ж. физ. химии**. 2006, Т. 80, № 12. С. 1887-1890.
5. **Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** «Влияние металлических вакансий на энергетические характеристики диборидов *s,p,d* металлов» // **Ж. неорган. химии**. 2007, Т.52, №2, С.95-99.
6. **Шеин И.Р., Шеин К.И., Ивановский А.Л.** «Упругие свойства ториевых керамик ThX (X = C, N, O, P, As, Sb, S, Se)» // **Письма в ЖТФ**, 2007. Т. 33, № 3, С. 72-79.
7. Кийко В.С., Горбунова М.А., Макурин Ю.Н., **Ивановский А.Л.** «Развитие технологии и перспективы применения ВеО-керамики в новых областях техники и специального приборостроения» // **Конструкции из композиционных материалов**. 2006. № 4. С. 98-100.
8. **Ивановская В. В., Ивановский А. Л.** «Структурные, электронные и магнитные свойства нанокompозитов: монолитные нановолокна титана, железа и цинка внутри углеродных нанотрубок» // **Материаловедение**. 2006. № 12. С. 10-13.
9. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Оценка термохимических свойств и термодинамических функций конденсированных метастабильных наночастиц CFe_n (n=1-5), C₂Fe₂, C_mFe (m = 2,3) и Fe₂» // **Исследовано в России**, 2006, <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2006/221.pdf> 221/060928, стр. 2113-2117.
10. Зацепин Д.А., Курмаев Э.З., **Шеин И.Р.**, Черкашенко В.М., Шамин С.Н., Чолах С.О. «Эффект больших доз в рентгеновских SiL_{2,3}-эмиссионных спектрах при имплантации кремния ионами железа в стационарном режиме. // **Физика твердого тела**, 2007. Т. 49, № 1, С. 72-77.
11. Кийко В. С., **Шеин И. Р.**, Горбунова М. А., Макурин Ю. Н., **Ивановский А. Л.** «Скорость и поглощение ультразвука в оксидной бериллиевой керамике» // **Стекло и керамика**. 2006. № 12. С. 29-33.
12. Вятчина В.Г., **Переляева Л.А.**, Зуев М.Г., Мамошин В.Л., **Бакланова И.В.** «Стеклообразование и колебательные спектры стекол в системах RSO₄ – Na₂B₄O₇ – K₂SO₄ (R=Mg, Ca, Sr, Ba) ” // **Физика и химия стекла**. 2006. Т. 32, № 6, с. 868-872.
13. Кулькова С.Е., Еремеев С.В., Постников А.В., **Шеин И.Р.** «Адсорбция цезия на поверхности β₂-AsGa(001)» // **Журнал экспериментальной и теоретической физики**. Т.131, №3, с.1-14.

14. **Шеин И. Р.**, Кийко В. С., Макурин Ю. Н. Горбунова М. А., **Ивановский А. Л.** «Упругие параметры моно- и поликристаллических вюртцитоподобных BeO и ZnO: ab initio расчеты» // **Физика твердого тела**, 2007. Т. 49, № 6, С. 1015-1020.
15. **И. Р. Шеин, М. В. Рыжков**, М. А. Горбунова, Ю. Н. Макурин, **А.Л. Ивановский**. «Намагничивание оксида бериллия в присутствии немагнитных примесей: бора, углерода и азота» // **Письма в ЖЭТФ**, 2007, Т. 85, №5, С. 298-303.
16. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Субсолидусная область и температуры эвтектики в некоторых бинарных системах» // **Ж. физической химии**. 2007. Т. 81, № 8, С. 1370-1374.
17. **Шалаева Е.В., Медведева Н.И., Шеин И.Р.** «Ab initio расчеты стабильности и структурных дефектов фаз $B_2-Cu_xFe_{1-x}Al$ » // **Физика твердого тела**. 2007. Т.49. №7, С.1195-1200.
18. **М.В. Кузнецов, Е.В. Шалаева**, А.Ф. Прекул, Н.И. Щеголихина. «Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии квазикристаллического $Al_{62.5}Cu_{25}Fe_{12.5}$ и кристаллического $\beta-Al_{50}Cu_{33}Fe_{17}$ сплавов» // **Известия РАН. Серия физическая**. 2007. Т.71. №5. С. 552-555.
19. **Ивановская В.В., Ивановский А.Л.** «Атомная структура, электронное строение и термическое поведение алмазоподобных нановолокон и нанотрубок» // **Неорган. материалы**. 2007, Т.43 № 4, С. 410-419.
20. Г. К. Моисеев, Т. В. Куликова, А. Б. Шубин, **Ивановский А.Л.** «Состав и теплофизические свойства систем Th + C с учетом метастабильных кластеров. I. Системы Th + C (1%) и Th + C (3%) при 2500÷4300 К.» // **Электр. журнал «Исследовано в России»**, <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/062.pdf>, 2007, с. 662-669.
21. Г. К. Моисеев, Т. В. Куликова, А. Б. Шубин, **Ивановский А.Л.** «Состав и теплофизические свойства систем Th + C с учетом метастабильных кластеров. II. Системы Th + C (1, 3, 5, 7, 9 масс. %) при 3300 ÷ 4300 К» // **Электр. журнал «Исследовано в России»**, <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/063.pdf>. 2007, с. 670-674.
22. **Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** «Новые магнитные полуметаллические материалы на основе ионных изоляторов, допированных немагнитными примесями: система $MgO + B,C,N$ » // **Письма ЖТФ**, 2007, Т.33, № 13, с. 1-8.
23. Баринов В.А., Цурин В. А., Новиков С.И., **Шеин И.Р.**, Суриков В.Т. Исследование ближнего атомного порядка в порошках Fe_2B // **Физика металлов металловед**. 2007. Т. 103. № 5. С. 497-508.
24. **Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** «Зонная структура, упругие, магнитные свойства и стабильность антиперовскитов $MCNi_3$ ($M=Y,Ag$) по данным FLAPW-GGA расчетов» // **Физика твердого тела**. 2007. Т.49. №9, С. 1626 – 1635.
25. Моисеев Г.К., Куликова Т.В., Шубин А.Б., **Ивановский А.Л.** "Термодинамическое моделирование систем ($WO_2 + Ar$) и ($WO_3 + Ar$) при 300-3000 К. I. Составы газовой фазы и конденсированной среды" **Электронный журнал "Исследовано в России"**, 094, стр. 975-981, 2007 г. [http:// zhurnal. ape .relarn.ru/articles/2007/094.pdf](http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/094.pdf)
26. Моисеев Г.К., Куликова Т.В., Шубин А.Б., **Ивановский А.Л.**"Термодинамическое моделирование систем ($WO_2 + Ar$) и ($WO_3 + Ar$) при300-3000 К. II. Составы газовой фазы и конденсированной среды с учетом образования оксидных раство-ров "Электронный журнал "Исследовано в России", 095, стр. 982-987, 2007 г. [http:// zhurnal.ape.relarn.ru/-articles/2007/095.pdf](http://zhurnal.ape.relarn.ru/-articles/2007/095.pdf)
27. Назарова С.З., Курмаев Э.З., **Медведева Н.И.** // «Физические свойства и электронная структура твердых растворов TaC – HfC». **Журнал неорган. химии**. 2007. Т.52. № 2. С.273-277.
28. Келлерман Д.Г., **Журавлев Н.А.**, Курбаков А. И., Зубков В.Г., Тютюнник А. П. «Магнитные превращения и структурное разупорядочение в манганите лития $LiMnO_2$ » // **Изв. РАН. Серия физическая**. 2007. Т.71. № 5. С.644-647.
29. В.Д. Журавлев, А.П. Тютюнник, Ю.А. Великодный, В.Г. Зубков, В.Г. Бамбуров, **И.Р. Шеин, А.Л. Ивановский**. «Синтез, кристаллическая структура и электронные свойства

- нового двойного ортованадата $\text{Sr}_2\text{Bi}_{2/3}(\text{VO}_4)_2$ // Доклады АН, сер. Физическая химия. 2007. Т. 415, № 3, С. 344-347.
30. А.П. Тютюнник, В.Г. Зубков, И.Ф. Бергер, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. «Кристаллическая структура и спектроскопические свойства соединений AVO_2SO_4 , $\text{A} = \text{K}, \text{Rb}$ » // Журнал неорганической химии. 2007. Т. 52, №9, С. 1521.
31. В.Г. Зубков, А.П. Тютюнник, И.Ф. Бергер, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. «Кристаллическая структура и спектроскопические свойства соединений $\text{A}[\text{VO}_2(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_2]\text{H}_2\text{O}$, $\text{A} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Tl}, \text{NH}_4$ » // Журнал неорганической химии. 2007. Т. 52, №9, С. 1512.
32. В.Г. Зубков, А.П. Тютюнник, В.Н. Красильников, И.Ф. Бергер, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**, В.Г. Бамбуров. «Кристаллическая структура и колебательные спектры диоксосульфатованадата (V) цезия $\text{II-CsVO}_2\text{SO}_4$ » // Доклады АН, сер. Химия.. 2007. Т. 415, №2, С. 202-205.
33. Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Состав канденсированной среды и парциальные давления компонентов газовой фазы при нагревании оксидов As_2O_5 и As_2O_3 : компьютер-ный эксперимент». // Журнал неорганической химии. 2007. Т. 52, № 6, С. 1005-1011.
34. **А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский**. «Деформация и разрушение тубулярных нанокристаллитов оксида магния при одноосном растяжении» // Деформация и разрушение материалов. 2007, № 5, С. 14-18.
35. **В.В. Ивановская**, A. Zobelli, G. Seifert, **А.Л. Ивановский**. «Размерно-, морфологически- и термически индуцированные фазовые превращения в бор-азотных нановолокнах» // Письма в ЖЭТФ, 2007, Т. 85, № 12, С.761-766.
36. Г.К.Моисеев, А.Б.Шубин, **А.Л.Ивановский**. «Влияние стабильных и метастабильных частиц на поверхностное натяжение расплавов систем $\text{Th}+\text{C}$ при 3300 и 4300 К» // Расплавы, 2007, №2, С.28-33.
37. Д.Г. Келлерман, С.П. Габуда, **Н.А. Журавлев**, А.С. Семенова, **Т.А. Денисова, Р.Н. Плетнев**. «ЯМР ^1H и ^7Li в дефектном кобальтите $\text{Li}_{0.6}\text{CoO}_2$ » // Журнал структурной химии, 2007, Т. 48, № 3, с.507-511.
38. Моисеев Г.К., Куликова Т.В., Шубин А.Б., **Ивановский А.Л.** «Термодинамическое моделирование систем ($\text{WO}_2 + \text{Ar}$) и ($\text{WO}_3 + \text{Ar}$) при 300-3000 К. I. Составы газовой фазы и конденсированной среды» // Электронный журнал "Исследовано в России, 2007, 094/070505, стр. 975-981.
39. Моисеев Г.К., Куликова Т.В., Шубин А.Б., **Ивановский А.Л.** «Термодинамическое моделирование систем ($\text{WO}_2 + \text{Ar}$) и ($\text{WO}_3 + \text{Ar}$) при 300-3000 К. II. Составы газовой фазы и конденсированной среды с учетом образования оксидных растворов» // Электронный журнал "Исследовано в России, 2007, 095/070505, стр. 982-987.
40. Моисеев Г.К., Куликова Т.В., Шубин А.Б., **Ивановский А.Л.** «Термодинамическое моделирование поведения оксидов Bi_2O_5 , BiO_2 , Bi_2O_3 , BiO и Bi_8O_{11} в среде аргона и кислорода. I. Термическая стабильность и агрегатное состояние». // Электронный журнал "Исследовано в России, 2007, 105/070524, стр. 1105-1110.
41. Моисеев Г.К., Куликова Т.В., Шубин А.Б., **Ивановский А.Л.** « Термодинамическое моделирование поведения оксидов Bi_2O_5 , BiO_2 , Bi_2O_3 , BiO и Bi_8O_{11} в среде аргона и кислорода. II. Парциальные давления компонентов газовой фазы. // Электронный журнал "Исследовано в России, 2007, 106/070524, стр. 1111-1117.
42. В.Н. Красильников, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**. «Особенности структуры ближнего и дальнего порядка в оксосульфатованадатах щелочных элементов, таллия и аммония по данным ЯМР ^{51}V , колебательной спектроскопии и структурного анализа». // Электронный журнал "Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы", <http://ptosnm.ru/>, 2006, 11/08.
43. **Я.В. Бакланова, Т.А. Денисова, Н.А. Журавлев**, И.А. Леонидов, Р.Ф. Самигуллина, О.Н. Леонидова. «ЯМР и подвижность лития в шпинелях $\text{Li}_{2x}\text{Zn}_{2-3x}\text{Ti}_{1+x}\text{O}_4$ ($0,33 < x < 0,67$)». // Электронный журнал "Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы", <http://ptosnm.ru/>, 2006, 11/09.

44. **Э.И. Юрьева**, М.И. Оштрах. Отличие квадрупольного расщепления и электронной структуры железа для моделей гема в α - и β - субъединицах дезоксигемоглобина и в дезоксимиоглобине: квантово-химические расчеты методом DFT-DVM // **Известия РАН. Серия физическая**, 2007, т.71, № 9, с. 1255 - 1260.
45. Г.К. Моисеев, Т. В. Куликова, А. Б. Шубин, **Ивановский А.Л.** «Расчет стандартных энтальпий образования летучих и конденсированных метастабильных частиц MC , MO , MC^+ , MO^+ , MC^- и MO^- , где M – 3d металлы» // **Материаловедение**. 2007. № 8. с. 9-12.
46. **Э.И. Юрьева**, **Н.А. Журавлев**, **Р.Н. Плетнев**. X_α -ДВМ и 1H ЯМР изучение особенностей процессов разложения молекул воды на поверхности оксидов TiO и TiO_2 // **Известия РАН. Серия физическая**, 2007, т.71, № 5, с. 758 - 760.
47. **Э.И. Юрьева**, **Р.Н. Плетнев**. «Особенности каталитического разложения молекул воды на активных центрах Cu_2O по результатам расчетов X_α - методом ДВ» // **Альтернативная энергетика и экология**, 2007, т. 7(51), с. 22 - 26.
48. Моисеев Г.К., Циганкова Е.Н., Смирнова О.А., Голуб Е.М., **Ивановский А.Л.** «Об использовании размерных характеристик компонентов твердых растворов в качестве критерия их образования» // **Исследовано в России**, 127/070905 , стр. 1302-1308 <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/127.pdf>
49. Моисеев К.Г., **Ивановский А.Л.** «Оценки возможности образования твердых растворов в некоторых перовскитоподобных системах с использованием размерных характеристик» // **Исследовано в России**, 126/070730, стр. 1299-1301 <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2007/126.pdf>
50. **Денисова Т.А.** Водородзамещенные фазы на основе металлатов лития Li_2MO_3 ($M=Ti, Zr, Sn$) // **Альтернативная энергетика и экология**. 2007. № 3 (47). С.39-44.
51. **М.В.Рыжков**, **Т.А.Денисова**. Роль релятивистских эффектов в электронном строении и химической связи гексацианоферрата свинца. **Ж. структ. химии**, 2007, Т. 48, № 1, с. 170-173. Т.А.
52. **Денисова Т.А.**, Максимова Л.Г., **Журавлёв Н.А.**, **Бакланова Я.В.**, Леонидова О.Н., **Бакланова И.В.** Состояние водорода в новом оксигидроксиде циркония **Альтернативная энергетика и экология**, 2007, № 7(51), с. 31-35.
53. **А.Н. Еняшин**, **А.Л. Ивановский**. «Новые автоинтеркалированные гипералмазы $C_{28}, Ti@C_{28}$ и $Zn@C_{28}$: кристаллическая структура, упругие и электронные свойства» // **Письма в ЖЭТФ**, 2007, Т.86, № 8, С. 609-615.
54. А.В. Пестов, **Н.А. Журавлев**, Ю.Г. Ятлук «Синтез-в-геле» – новый метод получения карбоксиэтилхитозана» // **Журнал прикладной химии**, 2007, т.80, № 7, С. 1184-189.
55. Н.В. Гаврилов, В.В. Иванов, А.С. Мамаев, Д.Р. Емлин, Н.Н. Коваль, Ю.Ф. Иванов, **М.В. Кузнецов**, А.С. Липилин, А.И. Медведев, Ал.А. Ремпель. “Структура и свойства защитных $Mn-Co-O$ покрытий на ферритной хромистой стали, нанесенных магнетронным распылением композитных мишеней.” // **Физика и химия обработки материалов**, 2005, № 5, С.
56. **Р.Н. Плетнев**, С.Г. Козлова, С.П. Габуда. «Динамика атомов водорода и структурные превращения в гидратах метаванадатов ns -элементов». // **Электронный журнал “Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы”**, <http://ptosnm.ru/>, 2007, 05/05.
57. В.С. Кийко, Ю.Н. Макурин, **Р.Н. Плетнев**. «Термовакuumное разложение гидроксида бериллия». // **Электронный журнал “Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы”**, <http://ptosnm.ru/>, 2006, 06/12.
58. А.Л. Бузлуков, В.С. Кийко, **Р.Н. Плетнев**, А.В. Скрипов, А.В. Солонинин. Состояние водорода в гидроксида бериллия: данные ЯМР на протонах // **Альтернативная энергетика и экология**, 2007, № 5 (49), с. 35 - 39.
59. В.И. Лопушан, Г.Ф. Кузнецов, **Р.Н. Плетнев**, Д.Г. Клещев. Фазовые превращения в $\gamma-Al(OH)_3$ при термообработке на воздухе и в парах воды // **Известия РАН. Серия физическая**, 2007, т. 71, № 8, с. 1222 - 1224.

60. В.И. Лопушан, Г.Ф. Кузнецов, **Р.Н. Плетнев**, Д.Г. Клещев. Кинетика фазовых превращений гиббсита при термообработке на воздухе и в парах воды // **Новые огнеупоры**, 2007, № 10, с. 63 - 67.
61. Габуда С.П., Козлова С.Г. **Плетнев Р.Н.** Электронные корреляции и динамика атомов водорода в гидрованадатах // **Доклады Академии наук**, 2007, т. 413, № 6, с. 1-4.
62. D.G. Kleshev, R.R. Klesheva, A.V. Tolchev, **R.N. Pletnev**. Phase transitions of γ -FeOOH during heat treatment in NaOH aqueous solutions // **Альтернативная энергетика и экология**, (ISJAEE), 2007, P. 98 - 102.
63. Волков В.Л., Кадырова Н.И., Захарова Г.С., **Кузнецов М.В.**, Подвальная Н.В., Михалев К.Н., Зайнулин Ю.Г. Ионное состояние атомов и свойства перовскитоподобного соединения $\text{CaCu}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ // **Журн. неорган. химии**. 2007. Т 52. № 3. С. 378-383.
64. Волков В.Л., Кадырова Н.И., Захарова Г.С., **Кузнецов М.В.**, Подвальная Н.В, Михалев К.Н., Зайнулин Ю.Г. Валентное состояние атомов и свойства перовскитоподобного соединения $\text{Sr}_x\text{Cu}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ ($x= 0,67$ -1,0). // **Неорганические материалы**. 2007. Т 43. № 6. С. 742-752.
65. Н.И. Кадырова, В.Л. Волков, Г.С. Захарова, **М.В.Кузнецов**, Н.В.Подвальная, К.Н. Михалев, Ю.Г. Зайнулин. “Термобарический синтез, валентное состояние атомов и свойства перовскитоподобных соединений $\text{ACu}_3\text{V}_4\text{O}_{12}$ (A-Ca, Sr)” // **Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы**, 2007, №2, с.1-3.
66. Кийко В.С., Горбунова М.А., Макурин Ю.Н., Неуймин А.Д., **А.Л. Ивановский А.Л.**. «Микроструктура и электропроводность композиционной керамики $\text{BeO}+\text{TiO}_2$ » // **Новые огнеупоры**, 2007. № 11. С.68-74.

V. ПАТЕНТЫ

1. **Решение о выдаче патента 28.07.2007 по заявке** на патент РФ № 2006124469. **Ивановский А.Л.**, Кийко В.С., Макурин Ю.Н. Устройство для передачи ультразвука. Совместная заявка ИХТТ УрО РАН и УГТУ-УПИ.
2. **Решение о выдаче патента 08.07.2007 по заявке** на патент РФ №2005140821. **Ивановский А.Л.**, Кийко В.С., Макурин Ю.Н., Акишин Г.П. Способ получения электропроводной керамики на основе оксида бериллия. Совместная заявка ИХТТ УрО РАН и УГТУ-УПИ.

VI. НЕРЕЦЕНЗИРУЕМЫЕ ИЗДАНИЯ (СБОРНИКИ И ПРОЧ.)

1. Моисеев Г.К. Куликова Т.В., **Ивановский А.Л.** «Термодинамические свойства метастабильных наночастиц Fe_xC_y и состав конденсированной среды системы Fe-C с их участием в интервале температур 1423 – 2273К» // Межрегиональный сборник научных трудов: «Теория и технология металлургического производства», Магнитогорск, ГОУ «ВПО МГТУ», вып. 6. 2006. С. 125-129.
2. **Устный доклад -Ya.V. Baclanova**. "NMR ^1H and ^7Li in $\text{Li}_{2-x}\text{H}_x\text{MO}_3$ (M=Ti, Zr)" // XI International Youth Scientific School "Actual Problems Magnetic Resonance and its Application", Kazan, 23-28 September 2007, Book of Abstracts, P.141.
3. **(Устный)Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, **Н.А. Журавлев, И.В. Бакланова**, М.А. Мелкозерова, Я.Н. Блиновсков, Е.В.Поляков «Влияние среды на сорбцию хлорида лития цианоферратом (II) цинка» // 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. – Ростов-на-Дону, п.Лoo, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 254с., с.29-32.
4. А.Л. Бузлуков, В.С. Кийко, **Р.Н. Плетнев**, А.В. Скрипов, А.В. Солонинин «Особенности поведения водорода в гидроксиде бериллия: данные ЯМР на протонах» // 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. –

- Ростов-на-Дону, п.Лоо, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 254с., с.42-45.
5. Н.А. Зайцева, Е.В. **Заболоцкая**, **Л.В. Золотухина**, Г.В. Базуев «ЭПР-исследования сложных оксидов марганца с квазиодномерной структурой» // 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 254с., с.125-128.
 6. **Т.А. Денисова**, О.Н. Леонидова, Л.Г. Максимова, **Н.А. Журавлев** «Взаимосвязь протонной структуры и проводящих свойств вольфрамовых гетерополикомплексов 12 ряда» // 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – ОДРО-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 12-17 сентября 2007 г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 236с., с.159-162.
 7. Д.Г. Келлерман, **Н.А. Журавлев** «Низкоразмерные обменные взаимодействия, структурная деформация и антиферромагнитное упорядочение в манганите лития LiMnO_2 » // 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – ОДРО-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 12-17 сентября 2007 г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 236с., с.40-43.
 8. **Я.В.Бакланова**, **Т.А.Денисова**, **Н.А.Журавлев**, В.Н.Красильников, **Р.Н.Плетнев**, О.В.Сивцова «ЯМР ^1H и особенности дегидратации гидратов селенованадатов калия и рубидия» // 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – ОДРО-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 12-17 сентября 2007 г.: Труды симпозиума. Ч. I. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 236с., с.191-193.
 9. С.П.Габуда, С.Г.Козлова, **Р.Н.Плетнев** «Порядок, беспорядок и фазовые переходы в гидратах ванадатов» // 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – ОДРО-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 12-17 сентября 2007 г.: Труды симпозиума. Ч. I. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 236с., с. 127-128.
 10. Куликова Т.В., Ильиных Н.И., Моисеев Г.К., **Ивановский А.Л.** «Изучение составов конденсированной и газовой фаз, образующихся при нагревании оксида ванадия V_2O_5 в атмосфере аргона и кислорода» // «Плавление и кристаллизация металлов и оксидов». Ростов-на-Дону, 2007, Сборник трудов, с. 81-82.
 11. **(Устный) Шалаева Е.В.**, Прекул А.Ф. «Структурное состояние и низкотемпературные фазовые превращения β -твердого раствора в сплавах квазикристаллообразующей системы Al-Cu-Fe » // 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 254с., с.215-218.
 12. **Шалаева Е.В., Медведева Н.И.** «Первопринципные расчеты стабильности и эффектов замещения в сплавах $\text{Al}_{50}(\text{Cu,Fe})_{50}\text{-Al}_{60}(\text{Cu,Fe})_{40}$ (тип Al_3Ni_2)» // 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 254с., с.219-222.
 13. **(Устный) Кузнецов М.В.** «Поверхностные адсорбционные структуры на ниобии и титане: исследование методами фотоэлектронной спектроскопии и дифракции.»// 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. I. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007. Т.1, с.231-235.
 14. **Разинкин А.С., Шалаева Е.В., Кузнецов М.В.**, «Поверхностные квазиупорядоченные наноструктуры NbOx/Nb(110) : исследование методами поверхностного анализа. // 10-й Международный симпозиум «Упорядочения в металлах и сплавах». – ОМА-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 19-24 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007., Т.2, с.122-126.
 15. **Шеин И.Р.**, Мелкозерова М.А., Банников Д.О., **Кузнецов М.В.**, Черепанов В.А., Ивановский А.Л., «Электронная структура никелатов лантана: РФЭС-исследование и компьютерное моделирование.» // 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – ОДРО-10. – Ростов-на-Дону, п.Лоо, 12-17 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. II. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 254с., с.93-96.

16. **Бакланова И.В.**, Леонидов И.А., **Переляева Л.А.** "Получение и колебательные спектры твердых растворов на основе LaGaO_3 " // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.1, с. 309-311
17. **(Устный) Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** "Новые магнитные материалы на основе перовскитов SrTiO_3 , SrZrO_3 и SrSnO_3 , допированных углеродом" // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.1, с. 311-314
18. Горбунова М.А., **Шеин И.Р.**, Кийко В.С., Макурин Ю.Н., **Ивановский А.Л.** "Исследование влияния примесей 3d-металлов на электронные и магнитные свойства оксида бериллия" // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.1, с. 323-325
19. Орлова В.А., **Юрьева Э.И.**, Буянова Е.С., Емельянова Ю.В., Жуковский В.М. "Квантово-химическое моделирование эффектов М->V замещения в оксидной керамике $\gamma\text{-Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ " // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.1, с. 349-352
20. **(Устный) Резницких О.Г., Переляева Л.А., Вовкотруб Э.Г., Зубков В.Г., Бамбуров В.Г.** "Колебательные спектры соединений $\text{LnNb}_7\text{O}_{12}$ ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$)" // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.1, с. 365-366
21. **Шеин И.Р.**, Горбунова М.А., Макурин Ю. Н., Кийко В.С., **Ивановский А.Л.** "Влияние s-, p-, d-примесей и структурных вакансий на электронные и магнитные свойства монооксида бериллия" // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.1, с. 379-383
22. **Ивановская В.В., Ивановский А.Л.** "Фазовые превращения в бор-азотных нановолокнах" // Международная конференция "Физико-химические процессы в неорганических материалах (ФХП-10)". Кемерово, 10-12 октября 2007 г./ Сборник докладов: Кемерово, Кузбассвуиздат, 2007. Т.2, с. 302-306
23. **(Устный) - Юрьева Э.И., Шапова Ю.В., Ивановский А.Л., Вотяков С.Л.** Квантово-химическое моделирование (Fe, Mn, Mg)-замещенных карбонатов // Спектроскопия и кристаллохимия минералов. Материалы международной научной конференции. Екатеринбург: Институт геологии и геохимии УрО РАН, 2007. С. 125 - 126.
24. Шапова Ю.В., Поротников А.В., **Юрьева Э.И., Ивановский А.Л., Вотяков С.Л.** Компьютерное моделирование атомной и электронной структуры хромшпинелей, расчеты спектроскопических параметров // Спектроскопия и кристаллохимия минералов. Материалы международной научной конференции. Екатеринбург: Институт геологии и геохимии УрО РАН, 2007. С. 123 - 125.
25. **(Устный) - Yuryeva E.I.** The reasons of proton motion from oxyhemoglobin active site to O_2 molecule // Advances in Modern Natural Sciences: Proceedings of 3rd International conference INTERNAS'2007, Kaluga, Russia, May 22 - 25, 2007/ Под ред. К.Г. Никифорова. - Калуга: Издательство КГПУ им. К.Э. Циолковского, 2007. - 328. с. 113 - 114.
26. Gemming S., **Enyashin A.N.**, Seifert G., „Theory of DNA-wrapped Carbon Nanotubes“, E-MRS 2007 Spring Meeting, Strasbourg, France, 2007. Symposium M: Nanotube and Nanowire Bio and Interfaces.
27. **Рыжков М.В.**, Купряжкин А.Я. "Электронное строение, химическая связь и полупроводниковые свойства диоксидов урана и плутония" // 10-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». – ОДРО-10. – Ростов-на-Дону, п.Лео, 12-17 сентября 2007г.: Труды симпозиума. Ч. III. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2007.- 238с., с.72-75.

28. **Р.Н. Плетнев**, С.Г. Козлова, С.П. Габуда. Динамика атомов водорода и структурные превращения в гидратах метаванадатов *ns*-элементов // **Электронный журнал “Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы”**, <http://ptosnm.ru/>, 2007.05.05.
29. В.С. Кийко, Ю.Н. Макурин, **Р.Н. Плетнев**. Термовакuumное разложение гидроксида бериллия // **Электронный журнал “Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы”**, <http://ptosnm.ru/>, 2006.06.12.
30. Строшков В.П., **Кузнецов М.В.**, Пшеничников В.А. Изменение химического состава поверхностных слоев титановых сплавов после электрохимической размерной обработки. Третья международная научно-практическая Конференция «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности». С-Петербург, 14-16 марта 2007 года. Сборник трудов.Т.8: Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования, образование/ Под ред. А.П.Кудинова, Г.Г. Матвиенко. СПб.: Изд-во Политехн. Ун-та, 2007.с. 87-90.
31. **Приглашенный – Enyashin A.N.** «Inorganic Fullerenes» // FOREMOST SP1 EU Meeting «Fullerene-based Opportunities for Robust Engineering: Making Optimised Surfaces for Tribology», Ljubljana (Slovenia), Josef Stefan Institute, 10-12 October 2007.

VII. ТЕЗИСЫ

1. **Приглашенный - Кузнецов М.В., Разинкин А.С., Шалаева Е.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** «Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция адсорбционных структур на поверхности ниобия и титана» //XIX Всероссийская школа-семинар «Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь», Ижевск, Физико-технический институт УрО РАН, 19-22 марта 2007, Сборник докладов, С. 26.
2. **Устный - Шеин И.Р., Шеин К.И., Медведева Н.И., Ивановский А.Л.** «Электронная структура, фазовая стабильность и спектральные характеристики торийсодержащих систем» //XIX Всероссийская школа-семинар «Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь», Ижевск, Физико-технический институт УрО РАН, 19-22 марта 2007, Сборник докладов, С. 59.
3. Зацепин Д.А., Курмаев Э.З., **Шеин И.Р.**, Черкашенко В.М., Шамин С.Н., Чолах С.О. «Особенности стационарной сканирующей имплантации ионов Fe^{+} в кристаллическом кремнии: рентгеновские Si $L_{2,3}$ спектры» //XIX Всероссийская школа-семинар «Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь», Ижевск, Физико-технический институт УрО РАН, 19-22 марта 2007, Сборник докладов, С. 84-85.
4. **Разинкин А.С., Кузнецов М.В., Шалаева Е.В., Шеин И.Р.** «Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция кислород-индуцированных структур на поверхности Nb(110)» //XIX Всероссийская школа-семинар «Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь», Ижевск, Физико-технический институт УрО РАН, 19-22 марта 2007, Сборник докладов, С. 134.
5. Тетерин Ю.А., Терерин А.Ю., **Рыжков М.В.**, Терехов В.А. «Изучение природы химической связи в UO_2 спектральными методами» //XIX Всероссийская школа-семинар «Рентгеновские и электронные спектры и химическая связь», Ижевск, Физико-технический институт УрО РАН, 19-22 марта 2007, Сборник докладов, С. 17.
6. Баринов В.А., Цурин В.А., Новиков С.И., **Шеин И.Р.**, Суриков В.Т. Мессбауэровские исследования ближнего порядка в порошках Fe_2V // Вторая Всероссийская конференция по наноматериалам «НАНО 2007», Новосибирск, 13-16 марта 2007 г., С. 284.
7. Красильников В.Н., **Переляева Л.А., Бакланова И.В.**, Лапина О.Б. «Особенности структуры ближнего и дальнего порядка в оксосульфатованадатах (V) щелочных элементов, таллия (I) и аммония по данным колебательной спектроскопии и ЯМР ^{51}V » // Всероссийская конференция «Современные подходы к проблемам физикохимии и катализа», Новосибирск, 16-19 мая 2007 г., С. 199.

8. **Приглашенный** - **Ивановский А.Л.** «Упругие и термические свойства неорганических нанотрубок и монокристаллических нанокристаллитов» // Керамика и композиционные материалы. Материалы VI всероссийской научной конференции. Сыктывкар, 2007, с. 21.
9. **Устный** - **Ивановский А.Л.** «Намагничивание немагнитных sp материалов в присутствии немагнитных sp примесей и структурных дефектов» // Керамика и композиционные материалы. Материалы VI всероссийской научной конференции. Сыктывкар, 2007, с. 29.
10. **Приглашенный** - **Ивановский А.Л.** «Компьютерное материаловедение композиционных наноматериалов на основе неорганических нанотрубок» // Школа молодых ученых «Новые композиционные материалы» - в рамках Всероссийской конференции «Керамика и композиционные материалы». Сыктывкар, 2007, с. 35.
11. **Приглашенный** – **Кузнецов М.В.** “Современные методы анализа поверхности твердого тела.”// XVII Российская молодежная конференция “Проблемы теоретической и экспериментальной химии”, Екатеринбург, 17-20 апреля 2007.
12. I.I. Leonidov, V.G. Zubkov, A.P. Tyutyunnik, N.V. Tarakina, **L.A. Perelyaeva, I.V. Baklanova**. «Crystal, structure and spectroscopic properties of germanates $\text{Ln}_2\text{Ca}(\text{GeO}_3)_4$, Ln = Gd, Ho, Er, Yb» // XIII Симпозиум Феофилова по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов, Иркутск, 9-13 июля 2007 г., С. 66.
13. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii** "New magnetic half-metals and semiconductors doped with non-magnetic sp-elements"// Euro-Asian Symposium "Magnetism on a Nanoscale", Kazan, 23-26 August 2007, Book of Abstracts, P.124
14. **I.R. Shein, A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** "Magnetization of carbon-doped MgO nanotubes"// Euro-Asian Symposium "Magnetism on a Nanoscale", Kazan, 23-26 August 2007, Book of Abstracts, P.251.
15. В.Г. Зубков, И.И. Леонидов, А.П. Тютюнник, Н.В. Таракина, Л.Л. Сурат, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. “Синтез, кристаллическая структура и спектроскопические свойства германатов $\text{Ln}_2\text{Ca}(\text{GeO}_3)_4$, Ln = Gd, Ho, Er, Yb” // VII международная научная конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии", г. Кисловодск, 17-22 сентября 2007 г, с. 396.
16. **И.В. Бакланова, И.А. Леонидов, Л.А. Переляева**. “Синтез и исследование твердых растворов на основе галлата лантана $(\text{La,Sr})(\text{Ga,Mg})\text{O}_{3-\delta}$ ” // VII международная научная конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии", г. Кисловодск, 17-22 сентября 2007 г, с. 369.
17. В.Н. Красильников, А.П. Штин, О.И. Гырдазова, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**. “Гликоляты ванадила и титана как прекурсоры при получении наноразмерных оксидов с протяженной формой частиц” // VII международная научная конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии", г. Кисловодск, 17-22 сентября 2007 г, с. 372.
18. **Т.А. Денисова, Л.Г. Максимова, О.Н. Леонидова, Н.А. Журавлев, И.В. Бакланова, Я.Н. Блиновсков, Е.В. Поляков**. “Влияние неводной фазы на состав и проводимость продуктов взаимодействия $\text{Zn}_2\text{Fe}(\text{CN})_6\text{-LiCl}$ ” // VII международная научная конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии", г. Кисловодск, 17-22 сентября 2007 г, с. 371.
19. М.Г. Зуев, **Л.А. Переляева, А.М. Карпов, Е.В. Заболоцкая**. “Синтез и спектральные характеристики твердых растворов $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{YO}_{3-\delta}$ ” // VII международная научная конференция "Химия твердого тела и современные микро- и нанотехнологии", г. Кисловодск, 17-22 сентября 2007 г, с. 397.
20. **Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** «Электронные и магнитные свойства монокристаллов 3d металлов со структурами типа B1, B2 и B3» // Там же, с. 374
21. **Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** «Новые тройные карбиды со структурой антиперовскита MCNi_3 (M=Y..Ag): электронное строение, стабильность, упругие и магнитные свойства» // Там же, с. 376

22. **Медведева Н.И., Шейн И.Р., Ивановский А.Л.** «Электронная структура, магнитные свойства, стабильность и градиенты электрического поля на ядрах железа в бинарных карбидах железа» // Там же, с. 415
23. **Ивановский А.Л.** «Компьютерное материаловедение неорганических нанотрубок» // XVIII Менделеевский съезд по общей и неорган. химии. СПб, 2007, с. 229.
24. **Шейн И.Р., Ивановская В.В., Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** «Квантово-химическое моделирование структурных, электронных и магнитных свойств монокристаллических нановолокон оксида цинка, легированных sp и d примесями». // Современная химическая физика, XIX симпозиум, г. Туапсе, 2007. с. 46.
25. **Рыжков М.В., Ивановский А.Л.,** Дэлли Б. Наночастицы Fe_nC_m : связь стабильности с составом и электронным строением. // Современная химическая физика, XIX симпозиум, г. Туапсе, 2007. с. 229.
26. **Denisova T.A.,** Maximova L.G., Polyakov E.V., **Shein I.R., Zhuravlev N.A.,** Leonidova O.N., **Baklanova Ya.V.** «Novel sorbents on the basis of oxi-hydroxides of IV group metals» // 18 Менделеевский съезд по общ. и прикл. химии. 23-28 сент. 2007. Москва. 2007. Тез. докл. С. 2481.
27. **Устный** - Oleg Kontsevoi, **Nadezhda Medvedeva,** Yuri Gornostyrev, Arthur J Freeman, Role of Topologically Close Packed Phase Precipitates in Ductilizing Cr-Re and Mo-Re Alloys. MRS Symposium II: Advanced Intermetallic-Based Alloys, November 27 – December 1, 2006. Boston, MA, P 115.23.
28. **Устный** - **Medvedeva N.I.,** Gornostyrev Y.N., Freeman A.J, «Intrinsic mechanism of the solid solution softening and hardening in bcc transition metals alloys: first principle calculations and atomic modeling, 2007 APS March Meeting, March 5–9, 2007; Denver, Colorado, P 23.5.
29. **Медведева Н.И.,** «Электронная структура и механические свойства Ti_3SiC_2 // Керамика и композиционные материалы. Материалы VI всеросс. научной конференции. Сыктывкар, 2007, с. 47.
30. **Юрьева Э.И., Плетнев Р.Н.** «Расчет X_α -методом ДВ условий протекания реакции фотокаталитического разложения молекул воды на поверхности Cu_2O » // Тезисы докладов XVIII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии: В 5 т.; т.3. - М.: Граница, 2007. С. 237.
31. Bar-Sadan M., **Enyashin A.N.,** Gemming S., Popovitz-Biro R., Hong S. Y., Prior Y., Tenne R., Seifert G., “Genuine Inorganic Fullerenes: $MoS_2/MoSe_2$ Nanooctahedra”, The 72nd Meeting of ICS, Tel-Aviv, Israel, Februar 6-7, 2007, P. 15
32. Gemming S., **Enyashin A.N.,** Seifert G., “Theoretical Investigation of DNA-wrapped CNTs”, XXIst International Winterschool, Euroconference on Electronic Properties of Novel Materials (IWEPM2007) “Molecular Nanostructures”, Kirchberg, Austria, March 10–17, 2007, P. 69
33. **Устный** - **Enyashin A.N.,** Seifert G., „Structure and Stability of Molybdenum Sulfide Fullerenes“, First symposium on Transition metal chalcogenide nanostructures (TMCN07), Rathen, Germany, March 18-21, 2007, P0006
34. Heine T., **Enyashin A.N.,** Stefanov-Dobrev M., Seifert G., „Mechanical stability of MoS_2 nanotubes“, First symposium on Transition metal chalcogenide nanostructures (TMCN07), Rathen, Germany, March 18-21, 2007, P0014
35. Kuc A., **Enyashin A.,** Seifert G., „Metal-Organic Frameworks: The Theoretical Characterization of Properties“, 106. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V., Graz, Austria, Mai 17-19, 2007, P. P126
36. Duarte H.A., Guimarães L., **Enyashin A.,** Heine T., Seifert G., “Imogolite Nanotubes”, NT07: Eighth International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil, June 24-29, 2007, B03
37. Seifert G., **Enyashin A.,** Gemming S., Taeger S., Ranjan N., Mertig M., „Carbon Nanotubes wrapped by DNA molecules“, NT07: Eighth International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil, June 24-29, 2007, C10

38. Seifert G., Heine T., Stefanov-Dobrev M., **Enyashin A.**, „Carbon and Inorganic Nanotubes under radial compression“, NT07: Eighth International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Ouro Preto, Minas Gerais, Brazil, June 24-29, 2007, E05
39. Bar Sadan M., Hong S.Y., Popovitz-Biro R., Cohen S.R., Prior Y., Tenne R., **Enyashin A.**, Gemming S., Seifert G., “Atomic Structure of MoS₂ Nanooctahedra: A Complimentary Study by High-Resolution (S)TEM and DFT Calculations”, The 41th Annual Scientific Meeting of ISM, Rehovot, Israel, May 15, 2007, P.62-63
40. Stefanov M., **Enyashin A.**, Heine T., Seifert G., „Mechanical Properties of Nanotubes and Fullerenes“, CARBON2007, The American Carbon Society International Conference on Carbon, Seattle, USA July 15-20, 2007, B122
41. **Устный** - **Enyashin A.N.**, Gemming S., Seifert G., „Carbon Nanotubes wrapped by DNA molecules“, SLONANO 2007: 6th Symposium of Science and Technology of Nanomaterials in Slovenia, Ljubljana, October 10 – 12, 2007, P. 30
42. Shlygin E., Mazurenko V., Ivanov V., Pustovarov V., **Kuznetsov M.**, Krugalov A., Shulgin B. “Intrinsic luminescence and band structure of Lu₂SiO₅ and Y₂SiO₅ crystals.” // IEEE – 9th International Conference on Inorganic Scintillators and their Applications (SCINT), Winston-Salem, NC, USA, June 4-8, 2007.
43. **Устный** – **Разинкин А.С.** “Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия и дифракция наномерных структур оксидов на поверхности монокристалла Nb(110) “, XVI зимняя школа по химии твердого тела, Февраль 6 – 10, 2007, с. 5
44. **Приглашенный** – **Ивановский А.Л.** “Компьютерное материаловедение наносистем”// XVII Российская молодежная конференция “Проблемы теоретической и экспериментальной химии”, Екатеринбург, 17-20 апреля 2007.
45. Волков В.Л., Подвальная Н.В., Волкова Е.Г., **Кузнецов М.В.** Новый гидролитический метод синтеза наноразмерных оксидов ванадия // XVIII Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. Москва. 2007. С. 687.
46. Поляков Е.В., Хлебников Н.А., Суриков В.Т., Трапезников В.А., Трапезникова В.Н., Григоров И.Г., Борисов С.В., **Кузнецов М.В.**, Удачин В.Н. Формы состояния Sr (II), U (VI), PЗЭ (III), Th (IV) в пробах воды р. Теча по данным ионного обмена, ультрафильтрации и электронной микроскопии // Ядерно-пром. комплекс Урала: проблемы и перспективы. 4-я молодежн. научно-практ. конф. Тез. докл. Озерск. 18-20 апр. 2007 г. Озерск: ФГУП “ПО Маяк”. 2007. С. 77.
47. **V.V. Ivanovskaya**, A. Zobelli, S. Enouz-Vedrenne, A. Loiseau, O. Stephan, C. Colliex. “Ab initio calculations of structure, stability and electronic properties of BN domains inside carbon nanotubes” Nanotec07, International Conference on carbon nanoscience and nanotechnology. 29th August - 1st September 2007 University of Sussex, Brighton (UK) p.120
48. **V.V. Ivanovskaya**, A. Zobelli, S. Enouz-Vedrenne, A. Loiseau, O. Stephan, C. Colliex. “Ab initio calculations of BN domains inside carbon nanotubes” GDR-I Nano-I Annual Meeting on Science and applications of Nanotubes. 15-19th October 2007, Autrans (France) p.54.
49. C. Colliex, O.Stéphan, M. Kociak, A. Gloter, A. Zobelli, **V. Ivanovskaya**, M. Kobylko, M. Tencé. “Measuring, analyzing and shaping individual nanotubes by (S)TEM and EELS techniques, with an eye on the nanoworld”. CIASEM. 23-29th September 2007, Cusco (Peru) p.L34.
50. **V.V. Ivanovskaya**, A. Zobelli, G.Seifert, C.Colliex. “Quantum -chemical simulation of structure, stability and properties of unidimensional nanostructures”. "Phénomènes physiques aux dimensions réduites" au LPS, 14 february 2007, Dourdan Le Normont (France) p. A241.
51. **V.V. Ivanovskaya**, A. Zobelli, V. Serin, C.Colliex. “Nb-doped MoS₂: structure, stability and electronic properties” 15-19 October, Foremost SP1 meeting, Ljubljana (Slovenia) p.47
52. V.S. Kijko, A.D. Pomogaev, M.A. Gorbunova, Yu.N. Makurin, A.M. Karpov, **A.L. Ivanovsky**. “Some reasons of defects origination during beryllium ceramics articles production” // The Fifth China International Conference on High-Perfomance Ceramics (CICC-5). Changsha, China, 10 to 13 May 2007. Conference Paper ID: D122.
53. V.S. Kijko, V.Ya. Vajspapir, M.A. Gorbunova, Yu.N. Makurin, **A.L. Ivanovskii** “Influence of impurity ferrous phases on the electrophysical properties of beryllium ceramics” // The

Fifth China International Conference on High-Performance Ceramics (CICC-5). Changsha, China, 10 to 13 May 2007. Conference Paper ID: D121

54. **Yuryeva E.I.** Chemical bonding and quadrupole splittings of ^{57}Fe Mossbauer spectrum in active sites of oxyhemoglobin as calculated by X_α -DV method // ICAME -2007. Programme and Abstracts. International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect. October 14-19, 2007. Indian Institute of Technology Kanpur. Kanpur -208 016 (INDIA). T5 - P20.
55. **Yuryeva E.I.**, Oshtrakh M.I. The DFT-DVM theoretical study of the differences of quadrupole splitting and the iron electronic structure for the rough heme modes for α - and β -subunits in deoxyhemoglobin and for deoxymyoglobin // XIV International Conference on Hyperfine Interactions, XVIII International Symposium on Nuclear Quadrupole Interactions. Program and Abstracts. August 5-10, 2007. Iguassu Falls (Puerto Iguazu-Argentina / Foz de Iguacu-Brazil). A joint Argentina-Brazil organization. P. 186.