

Лаборатория квантовой химии и спектроскопии (Ивановский А. Л.)

ноябрь 2008- ноябрь 2009

I. МОНОГРАФИИ

II. ОБЗОРЫ

1. **Ивановский А. Л.**, Ю.Н. Макурин, В.С. Кийко, М.А. Горбунова, **Шейн И. Р.** “Электронная структура и свойства оксида бериллия” // **Неорган. материалы**, Т.45, № 3, С.223-234 (2009).
2. **Ивановский А.Л.** «Нитриды и карбиды металлов платиновой группы: синтез, свойства и моделирование» // **Успехи химии**, Т. 79, № 4, С. 328-344 (2009).
3. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii, N.I. Medvedeva** “Nonstoichiometry in diborides of s, p, d metals” // Chapter in book: **Boron Based Solids**, (Ed.: L. Chkhartishvili) 2009: ISBN: 978-81-308-0339-5 (Ed.: L. Chkhartishvili) Research Signpost 37/661 (2), Fort P.O., Trivandrum-695 023, Kerala, India
4. **Ивановский А.Л.** «Новые сверхпроводники на основе тройных арсенидов (Ca,Sr,Ba) Fe₂As₂: синтез, свойства и моделирование» // **Ж. структ. химии**, Т. 50, № 3, С. 560-572 (2009).
5. **В.П. Жуков, Е.В. Чулков.** «Фемтосекундная динамика электронов в металлах» // **Успехи физических наук**, т.179, №2, С. 113-146 (2009).
6. **Ивановская В.В., Ивановский А. Л.** «О некоторых направлениях компьютерного материаловедения неорганических наноструктур» // **Наноструктуры. Математическая физика и моделирование**. Т.1, № 1, С. 7-24 (2009).

III. СТАТЬИ В ЗАРУБЕЖНЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **V.D. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural, electronic properties and stability of tungsten *mono- and semi-*carbides: A first principles investigation” // **J. Phys. Chem. Solids**, 2009, V. 70, No 1, P. 64-71
2. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Elastic properties and chemical bonding in ternary arsenide SrFe₂As₂ and quaternary oxyarsenide LaFeAsO – Basic phases for new 38–55 K superconductors from first principles” // **Physica C: Superconductivity**, 2009, V. 469, No 1, P. 15–19.
3. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic and structural properties of low-temperature superconductors and ternary pnictides ANi₂Pn₂ (A=Sr,Ba and Pn=P,As)” // **Phys. Rev. B**, 2009, V.79, N5, art. 054510.
4. **M.V. Ryzhkov, A.Ya. Kupruazhkin.** “First-principles study of electronic structure and insulating properties of uranium and plutonium dioxides” // **J. Nuclear Materials**, 2009, V. 384, P. 226-230.
5. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “Structural, electronic and elastic properties of ultra-light diamond-like crystalline allotropes of carbon-functionalized fullerenes C₂₈” // **Chem. Phys. Lett.**, 2009, V. 473, No 1-3, P. 108-110.
6. **A.N. Enyashin, I. Popov, G. Seifert** “Stability and electronic properties of rhenium sulfide nanotubes” // **phys. stat. sol. (b)**, 2009, V. 246, No 1, P. 114-118.
7. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “Structural, cohesive and electronic properties of Ti₅Si₃ nanotubes” // **Physica E**, 2009, V. 41, No 7, P.1217-1221.
8. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** “Квантово-химическое моделирование нанотрубок силикокарбидов титана Ti₂SiC, Ti₃SiC₂ и Ti₄SiC₃” // **Теор. эксперим. химия**, 2009, Т.45, N 2, С. 88-92.
9. **Bannikov V.V., Shein I.R. Ivanovskii A.L.** “Electronic properties and chemical bonding in layered quaternary oxyarsenides LaZnAsO and YZnAsO” // **Materials Chemistry and Physics**. 2009, V. 116, P. 129–133.
10. **V.D. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic properties of hexagonal tungsten monocarbide WC with 3d impurities from first-principles calculations” // **Physica B**, V. 404, N 14015, P. 1887-1891 (2009).

11. V.G. Zubkov, I.I. Leonidov, A.P. Tyutyunnik, N.V. Tarakina, L.L. Surat, **L.A. Pereleyeva, I.V. Baklanova**, O.V. Koryakova. Luminescence in $\text{Ln}_2\text{CaGe}_4\text{O}_{12}$ under infrared laser excitation // **J. Luminescence** 129 (2009) ?
12. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Structural and electronic properties of the new 17K superconductor $\text{Sr}_2\text{ScFePO}_3$ in comparison with hypothetical $\text{Sr}_2\text{ScFeAsO}_3$ ” // **Phys. Rev. B**. V. 79, N. 24, art. 245115 (1-7) (2009)
13. **V.D. Suetin, V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic and elastic properties of perovskite-like W_3NiC , W_3NiN and Co_3WC from first-principles calculations” // **phys.status solidi**, (b) V. B 246, No 7, P. 1646-1651 (2009).
14. O.Yu. Gutina, **N.I. Medvedeva, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**, J.E. Medvedeva, “Electronic structure and magnetic properties of Fe_3C with 2p and 3p impurities” // **physica status solidi (b)** 2009, V.246, No 9, p. 2167-2171.
15. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “Structural, cohesive and electronic properties of titanium oxycarbides ($\text{TiC}_x\text{O}_{1-x}$) nanowires and nanotubes: DFT modeling” // **Chem. Phys.**, 2009, V. 362, P.58-64.
16. **A.N. Enyashin**, R. Kreizman, G. Seifert “Capillary Imbibition of PbI_2 Melt by Inorganic and Carbon Nanotubes” // **J. Phys. Chem. C**, 2009, V. 113, P. 13664-13669.
17. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “First-principles study of structural, elastic and electronic properties of thorium dicarbide (ThC_2) polymorphs” // **J. Nuclear Mater.** V. 393, No 1, P.192-196 (2009)
18. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, N.I. Medvedeva, A.L. Ivanovskii** “The influence of nitrogen vacancies on the magnetic and electronic properties of ruthenium mononitride: First-principles study” // **J. Magten. Magnet. Mater.** V.321, No 21, P. 3624-3629 (2009).
19. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic and magnetic properties of superconducting $\text{Sr}_4\text{V}_2\text{Fe}_2\text{As}_2\text{O}_6$ versus $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{Fe}_2\text{As}_2\text{O}_6$ ” // **J. Supercond. Novel Magn.**, V.22, No 7, P. 613-617 (2009).
20. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii** “Influence of carbon, nitrogen and oxygen impurities on the ductility and electronic properties of fcc iridium: first-principles study.” // **Solid State Commun.**, V. 149, № 41-42, P. 1807-1809 (2009).
21. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Structural, electronic properties and intra-atomic bonding in new ThCr_2Si_2 -like arsenides SrRu_2As_2 , BaRu_2As_2 , SrRh_2As_2 and BaRh_2As_2 from first principles calculations”. // **Solid State Commun.**, V.149, № 41-42, P. 1860-1865 (2009)
22. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Hydrogen-induced enhancement of ductility of fcc iridium: A first-principles study.” // **Materials Letters**. 63, № 28, P. 2413-2415 (2009)
23. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii** “*Ab initio* predictions of stability, elastic and electronic properties of cubic rhodium carbides RhC_x as dependent on carbon content.” // **phys. status solidi – RRL**, 2009, V.3, No 7-8, P. 218-220.
24. **V.D. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii** “Structural, electronic and magnetic properties of 3 carbides ($\text{Fe}_3\text{W}_3\text{C}$, $\text{Fe}_6\text{W}_6\text{C}$, $\text{Co}_3\text{W}_3\text{C}$ and $\text{Co}_6\text{W}_6\text{C}$) from first principles calculations.” // **Physica B**, V 404, No 20, P.3544-3549 (2009)
25. N. V. Tarakina, **T. A. Denisova**, L. G. Maksimova, **Y. V. Baklanova**, A. P. Tyutyunnik, I. F. Berger, V. G. Zubkov, G. van Tendeloo / “Investigation of stacking disorder in Li_2SnO_3 ” // **Z. Kristallogr. Suppl.** 30 (2009) 375-380 / DOI 10.1524/zksu.2009.0055
26. A. Kuc, **A.N. Enyashin**, J.-O. Joswig, G. Seifert “Trends in the properties of selected metal-organic framework structures: a theoretical study” // **Materials Issues in a Hydrogen Economy**, 2009, P. 173-183.
27. **V.V. Ivanovskaya**, Alberto Zobelli, Odile Stephan, Patrick R. Briddon and Christian Colliex “BN Domains Included into Carbon Nanotubes: Role of Interface” // **J. Phys. Chem. C**, 2009, 113 (38), pp 16603–16609
28. **M.V. Ryzhkov**, A.Yu. Teterin, Yu.A. Teterin “Fully relativistic calculations of ThF_4 ” // **Int. J. of Quantum Chem.** 2009, V 109, P.3143-3504.

IV. СТАТЬИ В ОТЕЧЕСТВЕННЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Шейн И.Р., Ивановский А.Л.** “Зонная структура $(\text{Sr}_3\text{Sc}_2\text{O}_5)\text{Fe}_2\text{As}_2$ как возможной базисной фазы новых FeAs сверхпроводников” // **Письма в ЖЭТФ**, Т. 89, № 1, С. 40-44 (2009)
2. **Суетин Д.В., Шейн И.Р., Ивановский А.Л.** “Электронная структура карбонитридов вольфрама $\text{WC}_{1-x}\text{N}_x$ ” // **Ж. структ. химии**. 2009, Т.50, №1, С. 7-15.

3. Суетин Д.В., Шеин И.Р., Бамбуров В.Г., Ивановский А.Л. “Влияние углеродных вакансий на стабильность и электронные свойства твердых растворов в системе W-Al-C: первопринципные расчеты.”// ДАН, физ. химия. 2009. Т. 424, № 1, С. 14-16.
4. Шеин И.Р., Ивановский А.Л. “Зонная структура нового слоистого сверхпроводника $\text{La}_3\text{Ni}_4\text{P}_4\text{O}_2$ ” // Письма в ЖЭТФ, Т.89, № 6, С. 332-337 (2009).
5. Тетерин А.Ю., Рыжков М.В., Тетерин Ю.А., Вукчевич Л., Терехов В.А., Маслаков К.И., Иванов К.Е. “Природа химической связи в ThO_2 .”// Инженерная физика. 2009. № 2, С. 30-38.
6. Шеин И.Р., Ивановский А.Л. “Химическая связь в LaOFeAs , SrFe_2As_2 и LiFeAs – базисных фазах новых 18-56К сверхпроводников” // Ж. структ. химии, Т.50, №3, С. 540-552 (2009).
7. Шеин И.Р., Ивановский А.Л. “ Зонная структура новых слоистых сверхпроводников BaRh_2P_2 и BaIr_2P_2 ” // Письма в ЖЭТФ, Т. 89, № 7, С. 418-422 (2009)
8. А.А. Селютин, Н.А. Журавлев, Н.П. Бобрышева, Т.А. Денисова «Состояние атомов переходных элементов в разбавленных твердых растворах на основе LiMO_2 (M – Sc, Ga, Al). III. Состояние атомов железа и лития в твердых растворах $\text{LiFe}_x\text{Sc}_{1-x}\text{O}_2$ » // Ж. общей химии. 2009. Т. 79. Вып.4. С.533 - 537.
9. Т.А. Денисова, Л.Г. Максимова, О.Н. Леонидова, Н.А. Журавлев «Физико-химические характеристики цианоферратов (II) цинка» // Журнал неорганической химии. 2009. Т.54, №1. С.8 - 14.
10. Шеин И.Р., Ивановский А.Л. «Электронные и упругие свойства сверхпроводящего наноламината Ti_2InC » // Физика твердого тела, 2009, Т. 51, № 8, С.1517-1520.
11. Т.А. Денисова, Л.Г. Максимова, О.Н. Леонидова, М.А. Мелкозерова, Н.А. Журавлев, Е.В. Поляков «Сорбция хлорида лития цианоферратом (II) цинка в неводной среде» // Журнал неорганической химии. 2009. Т.54, №5. С.707-716.
12. Т.А. Денисова, Н.А. Журавлев, Л.Г. Максимова «ЯМР в системах $\text{M}_2\text{Fe}(\text{CN})_6 \cdot n\text{H}_2\text{O} - x\text{LiCl}$ (M=Zn, Sn, Pb)» // Известия РАН. Серия физическая. 2009. Т.73, №7. С.1001-1004.
13. Кузнецов М.В., Борисов С.В., Шепатковский О. П., Векслер Ю.Г., Кожевников В.Л., Исследование покрытий TiC-C методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2009, №5, С.3-10.
14. М.В.Кузнецов, А.С. Разинкин, Е.В. Шалаева “Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция поверхностных наноразмерных структур $\text{NbO}/\text{Nb}(110)$ ” // Ж. структ. химии. Т.50, №3. С. 536-543 (2009).
15. И.А. Леонидов, И.В. Бакланова, Л.А. Переляева, О.Н. Леонидова, Р.Ф. Самигуллина, В.Л. Кожевников. Влияние двухзарядных катионов на структурные параметры, фазовые переходы и электропроводность кислородных проводников на основе LaGaO_3 // ДАН, Химия Т.427, № 6. С. 785-789 (2009)
16. М.А. Коняева, Н.И. Медведева, «Электронная структура, магнитные свойства и стабильность бинарных и тройных карбидов $(\text{FeCr})_3\text{C}$ и $(\text{FeCr})_7\text{C}_3$ » // Физика твердого тела. 2009. Т. 51, № 10, С. 1965-1969.
17. Шеин И.Р., Ивановский А.Л. «Упругие свойства моно- и поликристаллических LaFeAsO , SrFe_2As_2 и LiFeAs – базисных фаз новых FeAs $\langle 1111 \rangle$, $\langle 122 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ сверхпроводников» // Письма в ЖТФ, Т.35, № 20, С. 70-76 (2009)
18. В.П. Жуков, Е.В. Чулков, «Ab initio расчеты времени и длины спиновой релаксации возбужденных электронов в металлах методом GW с включенным спин-орбитальным взаимодействием» // Физика твердого тела, т. 51, вып. 11, С. 2085-2093 (2009).
19. В. Н. Красильников, Л. А. Переляева, И. В. Бакланова, Л. Ю. Булдакова, М. Ю. Янченко. Синтез и свойства октаванадатов $\text{M}_2\text{V}_8\text{O}_{21}$ (M = K, Tl) и твердых растворов $\text{K}_{2-x}\text{Tl}_x\text{V}_8\text{O}_{21}$ ($0 \leq x \leq 2$) // Журнал неорганической химии. 2009. Т. 54, № 10, с. 1611-1617.
20. Суетин Д.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л. «Электронная структура алюмокарбидов вольфрама W_2AlC и WAlC_2 » // Журнал неорганической химии. 2009. Т. 54, № 9, С. 1503-1509.
21. Поляков Е.В., Волков И.В., Суриков В.Т., Переляева Л.А., Швейкин Г.П. “Поведение компонентов монацита в растворах гуминовых кислот” // ДАН. Химия. 2009. Т. 428. № 5. С. 1-4.
22. Н.А. Журавлев, Н.А. Мухина, Д.Г. Келлерман В.С. Горшков. “Процессы структурного разупорядочения в шпинели $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$, легированной хромом”. // Известия РАН. Серия физическая. 2009. Т.73, №11. С.1602-1605.

23. И.Е. Анимица Н.А. Кочетова, **Т.А. Денисова, Н.А. Журавлев, И.В. Бакланова**. “Процессы гидратации и протонный транспорт в твердых растворах на основе Ba_2CaWO_6 ” // **Журнал физической химии**. 2009. Т.83., №2. С. 262-268.
24. Шайхлисламова А.Р., **Журавлев Н.А.**, Стенина И.А., Ярославцев А.Б. Катионная подвижность в сложных фосфатах состава $\text{Li}_{3-2x}\text{Nb}_x\text{In}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ // **Журнал неорганической химии**. 2008. Т.53, №12. С.1957-1962.
25. Шайхлисламова А.Р., Стенина И.А., Архангельский И.В., Ребров А.И., **Журавлев Н.А.**, Ярославцев А.Б. Фазовые переходы и катионная подвижность в сложных фосфатах состава $\text{Li}_{3-2x}\text{Nb}_x\text{In}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ // **Журнал неорганической химии**. 2009. Т.54, №4. С.552-557.
26. Пинус И.Ю., Шайхлисламова А.Р., Стенина И.А., **Журавлев Н.А.**, Ярославцев А.Б. Фазовые переходы в сложных фосфатах состава $\text{LiM}_2(\text{PO}_4)_3$ (M – Ti, Zr) и $\text{LiInNb}(\text{PO}_4)_3$ со структурой NASICON // **Неорган. материалы**. 2009. Т.45, №12. С.1466-1470.
27. Сударева С.В., **Кузнецов М.В.**, Кузнецова Е.И., Блинова Ю.В., Романов Е.П., Бобылев И.Б. Природа разупорядочения тяжелых атомов в монокристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$ (1,5 вес.% Ce): рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия // **ФММ**, 2009, т. 108, № 6, с. 602-612.
28. А.Ю.Тетерин, **М.В.Рыжков**, Ю.А.Тетерин, Л.Вукчевич, В.А.Терехов, К.И.Маслаков, К.Е.Иванов «Природа химической связи в ThO_2 » // **Инженерная физика**, 2009, №2, С.30 - 38.
29. А.Ю.Тетерин, **М.В.Рыжков**, Ю.А.Тетерин, Л.Вукчевич, В.А.Терехов, К.И.Маслаков, К.Е.Иванов «Природа химической связи в ThF_4 » // **Радиохимия**, 2009, Т.51, №6, С.481 - 488.
30. А.Ю.Тетерин, **М.В.Рыжков**, Ю.А.Тетерин, К.И.Маслаков, Т.Райх, С.Л.Молодцов «Эмиссия валентных электронов ThO_2 при возбуждении синхротронным излучением вблизи $\text{O}_{4,5}(\text{Th})$ – порога резонансного поглощения» // **Радиохимия**, 2009, Т.51, №6, С.489 – 494.
31. А.А. Селютин, **Н.А. Журавлев**, Н.П. Бобрышева, **Т.А. Денисова**. Состояние атомов переходных элементов в разбавленных твердых растворах на основе LiMO_2 (M – Sc, Ga, Al). III. Состояние атомов железа и лития в твердых растворах $\text{LiFe}_x\text{Sc}_{1-x}\text{O}_2$. // **Ж. общей химии**. 2009. Т. 79. Вып.4. С.533-537.
32. Фетисов А.В., **Кузнецов М.В.**, Анализ электронных состояний оксидного слоя на поверхности ультрадисперсной меди методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. // **Журнал прикладной спектроскопии**. 2009, Т.76, №4, С.552-556.
33. **Кузнецов М.В.**, Борисов С.В., Шепатковский О. П., Векслер Ю.Г., Кожевников В.Л., Исследование покрытий TiC-C методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. // **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования**, 2009, №5, С.3-10.

V. ПАТЕНТЫ

1. Борисов С.В., Григоров И.Г., **Кузнецов М.В.**, Поляков Е.В., Хлебников Н.А., Швейкин Г.П., Шепатковский О.П. Способ изготовления фильтрующего элемента и поворотное приспособление для его изготовления. Патент на изобретение № 2361965С1, 20.07.2009 г., опубликовано Бюл.№20.

VI. НЕРЕЦЕНЗИРУЕМЫЕ ИЗДАНИЯ (ЭЛ. ПРЕПРИНТЫ, СБОРНИКИ И Т.Д.)

1. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Band structure of new layered 17K superconductor $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{Fe}_2\text{P}_2\text{O}_6$ in comparison with hypothetical $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{Fe}_2\text{As}_2\text{O}_6$ ” // **cond-mat.arXiv: 0903.4038** (2009).
2. **V.D. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic properties of hexagonal tungsten monocarbide WC with 3d impurities from first-principles calculations” // **cond-mat.arXiv : 0903.5387** (2009).
3. **V.D. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. Structural, electronic and magnetic properties of 3 carbides ($\text{Fe}_3\text{W}_3\text{C}$, $\text{Fe}_6\text{W}_6\text{C}$, $\text{Co}_3\text{W}_3\text{C}$ and $\text{Co}_6\text{W}_6\text{C}$) from first principles calculations” // **cond-mat.arXiv : 0903.5390** (2009).
4. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic structure of Ti-doped $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{Fe}_2\text{As}_2\text{O}_6$ ” // **cond-mat.arXiv : 0904.0117** (2009).
5. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic properties of superconducting $\text{Sr}_4\text{V}_2\text{Fe}_2\text{As}_2\text{O}_6$ versus $\text{Sr}_4\text{Sc}_2\text{Fe}_2\text{As}_2\text{O}_6$ ” // **cond-mat.arXiv : 0904.2671** (2009).

6. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Trends in structural and electronic properties for layered SrRu_2As_2 , BaRu_2As_2 , SrRh_2As_2 and BaRh_2As_2 from *ab initio* calculations” // **cond-mat.arXiv : 0905.2255** (2009).
7. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Elastic properties of superconducting LiFeAs from first principles” // **cond-mat.arXiv : 0905.3126** (2009).
8. **Viktoriya V. Ivanovskaya,** Alberto Zobelli, Odile Stephan, Patrick R. Briddon, Christian Colliex “BN domains included into carbon nanotubes: role of interface” // **cond-mat.arXiv : 0907.1574** (2009)
9. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural and electronic properties of new “122” pnictogen-free superconductor SrPd_2Ge_2 as compared with SrNi_2Ge_2 and SrNi_2As_2 : first principles calculations” // **cond-mat.arXiv : 0908.4135** (2009).
10. **Я.В. Бакланова,** Л.Г. Максимова, **Н.А. Журавлев,** В.Я. Кавун, **Т.А. Денисова.** Влияние дисперсности на физико-химические свойства метатитановой кислоты. // 12-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах».–ОМА-12, Ростов-на-Дону, п.Лоо, 10-16 сентября 2009г.: Труды симпозиума. Том I.- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2009.- 308 с. С.182-184.
11. Мелкозерова М.А., **Бакланова И.В.,** Самигуллина Р.Ф., **Переляева Л.А.,** Базуев Г.В. Колебательная спектроскопия и термическое поведение сложных оксидов $\text{A}_4\text{A}'\text{B}_2\text{O}_9$ (A – Sr; A' – Co, Ni; B – Co, Ni, Mn) // XII Международный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”. Сборник трудов (часть II). Сочи. 2009. С.31-35
12. Красильников В.Н., Гырдасова О.И., Тютюнник А.П., Зубков В.Г., **Переляева Л.А., Бакланова И.В.** Ацетат скандия $\text{Sc}(\text{CH}_3\text{COO})_3$ – прекурсор для получения микро – и нановискеров оксида скандия Sc_2O_3 // XII Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов». Сборник трудов (часть I). Сочи. 2009. С.288-289.
13. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic properties of novel 6K superconductor LiFeP ” // **cond-mat.arXiv : 0910.2550** (2009)
14. **Ивановский А.Л., Медведева Н.И., Рыжков М.В., Шеин И.Р., Суетин Д.В., Еняшин А.Н.,** Софронов А.А., Горбунова М.А., **Банников В.В.,** Шеин К.И. «Компьютерное моделирование функциональных свойств новых керамических материалов на основе слоистых карбидов металлов (т.н. наноламинатов)» // Сб. Результаты научных работ, полученные за 2008 г. Аннотационные отчеты. Региональный конкурс РФФИ-Урал. Изд-во УрО РАН, 2009, С. 104-105.
15. **V.P. Zhukov.** “Femto-second dynamics of electron excitation in Fe and Ni: first-principle GW and T-matrix approach”. International workshop “Modern computational approaches in iron based alloys”, 1-3 October, Ekaterinburg, Russia.
16. М.А.Мелкозерова, **Е.В.Заболоцкая, Д.Г.Келлерман, А.С. Семенова,** Е.Ю. Медведев, Г.В.Базуев. “Магнитные свойства квазиодномерных сложных оксидов $\text{Ba}_4\text{Ni}_{5-x}\text{Mn}_x\text{O}_{15}(x=2,3,4)$ ” // Proceedings of the international meeting ODPO-12. Порядок-беспорядок и свойства оксидов 12-й международный симпозиум, 17-22 сентября г. Ростов-на-Дону-пос. Лоо, Россия, Т.2, стр.35-38
17. **Семенова А.С., Келлерман ДГ.** Самигуллина Р.Ф. Особенности синтеза и разложения фазы $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$.Труды Всероссийской конференции «Исследования в области переработки и утилизации техногенных образований и отходов. Екатеринбург 24-27 ноября 2009, стр.398-401.
18. **М.В. Рыжков,** В.А. Виллисов, В.П. Молошаг, Д.В. Вилисов «Электронная структура хрома шпинелях». // 12-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах».–ОМА-12, Ростов-на-Дону, п.Лоо, 10-16 сентября 2009г.: Труды симпозиума. Том II.- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2009.- 308 с. С.140-143.
19. **М.В.Рыжков, А.Л.Ивановский,** Б.Дэлли. “Магнитное упорядочение в наиболее стабильных геометрических структурах наночастиц Fe_nC_m ” // Proceedings of the international meeting ODPO-12. Порядок-беспорядок и свойства оксидов 12-й международный симпозиум, 17-22 сентября г. Ростов-на-Дону-пос. Лоо, Россия, Т.2, стр.112 – 115.
20. **Н.И.Медведева.** “Распределение примесей и магнетизм в ОЦК и ГЦК сплавах Fe-Mn-C” // Proceedings of the international meeting Multiferroics-2009. Среды со структурным и магнитным упорядочением, международный симпозиум, 23-28 сентября г. Ростов-на-Дону-пос. Лоо, Россия, Т.2, стр.107-110.
21. Гребенников В.И., Кузнецова Т.В., **Кузнецов М.В.** Электронная структура соединений на основе CuInSe_2 по спектрам рентгеновской и ультрафиолетовой фотоэмиссии. // Сборник трудов 12

международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов", Ростов-на-Дону, п.Лео, 17-22 сентября 2009, Т.1, с. 191-195.

22. Блинова Ю.В., **Кузнецов М.В.**, Сударева С.В., Романов Е. П., Кузнецова Е.И. Природа разупорядочения тяжелых атомов в монокристаллах $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$ (1.5 ат.% Ce) в процессе низкотемпературного распада. // Сборник трудов 12 международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов", Ростов-на-Дону, п.Лео, 17-22 сентября 2009, Т.1, с. 94-96.
23. **Кузнецов М.В., Разинкин А.С., Шалаева Е.В.**, Захарова Г.С., Подвальная Н.В. Фотоэлектронная спектроскопия и дифракция как метод исследования поверхности. практические приложения. // Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы, 2009, №8, С.1-4.
24. **Разинкин А.С., Шалаева Е.В., Кузнецов М.В.** Квазиупорядоченные NbO-структуры на Nb(110): СТМ-микроскопия и электронная спектроскопия. // Сборник трудов XII международного симпозиума "Порядок, беспорядок и свойства оксидов", Ростов-на-Дону, п.Лео, 17-22 сентября 2009, Т. 2 , с. 103-105.
25. Выходец В.Б., Куренных Т.Е., Кесарев А. Г., **Кузнецов М.В.**, Кондратьев В.В., Давлетшин А.Э. Кестер Ю., Хулсен К., Кинетика диффузионных процессов для меченых атомов углерода и кислорода в системе Zr-O-C. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Том 8, С.1-21.

VII.ТЕЗИСЫ

1. T. Heine, A. Kuc, **A.N. Enyashin**, L. Zhechkov, G. Seifert "Fullerene-based Carbon Solids, Carbon Foams and Composite Nanotubes" // 215th ECS Meeting - San Francisco, USA 2009, P. 1232.
2. R. Luschinetz, T. Milek, **A.N. Enyashin**, J. Frenzel, S. Gemming, G. Seifert "DFT-study of the adsorption of organic molecules on low index titanium dioxide surfaces" // Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft e.V., Symposium Self-Organized Surfaces and Interfaces, Dresden, Germany, March 22-29, 2009, Europhysics Conference Abstracts, SYSO 3.24
3. G. Seifert, Th. Lorenz, **A. Enyashin** "The influence of Defects in Inorganic Nanotubes on Electronic and Mechanical Properties" // Abstracts of CECAM-HQ-EPFL "Computational studies of defects in nanoscale carbon materials", May 11-13, Lausanne, Switzerland, abs. 2978.
4. Селютин А.А., **Журавлев Н.А.**, Бобрышева Н.П., **Денисова Т.А.** «Исследование процессов нанокластеризации в LiFeO_2 » // «Третья всероссийская конференция по наноматериалам НАНО 2009». Тезисы докладов. Екатеринбург, 20-24 апреля 2009 г. – Екатеринбург: Уральское издательство, 2009. – 800с., ил. С.234-236.
5. **(Устный доклад - Кузнецов М.В.) Кузнецов М.В., Разинкин А.С., Шалаева Е.В.** "Квазиупорядоченные NbO_x -наноструктуры на поверхности Nb(100): РФЭС-, РФД- и СТМ-исследование" // "Третья всероссийская конференция по наноматериалам НАНО 2009 ". Тезисы докладов. Екатеринбург, 20-24 апреля 2009 г. – Екатеринбург: Уральское издательство, 2009. – 800с., ил. С.565-567.
6. **Разинкин А.С., Шалаева Е.В., Кузнецов М.В.** "Наноструктуры оксида ниобия на Nb(110): экспериментальное исследование методами РФЭС, РФД и СТМ" // "XIX-я российская молодежная научная конференция, посвященная 175-летию со дня рождения Д.И. Менделеева". Тезисы докладов. Екатеринбург, 27-29 апреля 2009 г. Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2009. – 400с., ил. 362-363.
7. **(Устный доклад - A.N. Enyashin), A.L. Ivanovskii** "Magnetic Properties of Low-Dimensional NiCl_2 Hollow Nanostructures" // Abstracts of Workshop on Transition Metal Chalco/Halide Nanostructures TMCN09 – Taormina, Italy, 23-26 May 2009, P. 32.
8. **(Устный доклад - A.N. Enyashin)**, G. Seifert "Capillary Imbibition of Liquid Salts into Inorganic and Carbon Nanotubes" // Abstracts of Workshop on Transition Metal Chalco/Halide Nanostructures TMCN09 – Taormina, Italy, 23-26 May 2009, P. 42.
9. **(Устный доклад) Шалаева Е.В., Прекул А.Ф.** "Структурные превращения и наноразмерные дефекты в квазикристаллообразующих сплавах Al-Cu-Fe" // "Третья всероссийская конференция по наноматериалам НАНО 2009 ". Тезисы докладов. Екатеринбург, 20-24 апреля 2009 г. – Екатеринбург: Уральское издательство, 2009. – 800с., ил. С.390-392.

10. **Н.И. Медведева**, «Электронная структура, магнетизм и сверхтонкие взаимодействия в сплавах Fe-Mn-C» // XI Международная конференция Мессбауэровская спектроскопия и ее применения, Екатеринбург, 1-5 июня, 2009, Тезисы докладов, с.40. (стендовый доклад)
11. **(Устный доклад - A.N. Enyashin)**, T. Heine, G. Seifert, **A.L. Ivanovskii** "Computational Challenges for Mechanical Properties of Inorganic and Carbon Nanotubes" // Abstracts of International Workshop "Trends in nanomechanics and nanoengineering" – Krasnoyarsk, Russia, 24-28 August 2009, P. 16.
12. **(Стендовый доклад - A.N. Enyashin)**, G. Seifert, **A.L. Ivanovskii** "Capillary Properties of Inorganic and Carbon Nanotubes towards Salts" // Abstracts of International Workshop "Trends in nanomechanics and nanoengineering" – Krasnoyarsk, Russia, 24-28 August 2009, P. 16-17.
13. **В.П. Жуков**, В.М. Зайнуллина, В.Н. Красильников. «Влияние допирования ванадием и углеродом на кристаллическую структуру, оптические и фотокаталитические свойства анатаза» II МЕЖДУНАРОДНЫЙ, МЕЖДИСЦИПЛИНАРНЫЙ СИМПОЗИУМ «ПОРЯДОК, БЕСПОРЯДОК И СВОЙСТВА ОКСИДОВ» (ОДРО-12)– Ростов-на-Дону, п.Лоо, 17-22 сентября 2009г.: Труды симпозиума. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2009.- стр. 57. (стендовый доклад).
14. В.М. Зайнуллина, М.А. Коротин, **В.П. Жуков**. «Влияние кислородных вакансий и легирования атомами ванадия на природу ферромагнетизма в диоксиде титана со структурой анатаза». «СРЕДЫ СО СТРУКТУРНЫМ И МАГНИТНЫМ УПОРЯДОЧЕНИЕМ» (MULTIFERROICS-2)– Ростов-на-Дону, п.Лоо, 23-28 сентября 2009г.: Труды симпозиума. – Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, 2009. с. 89. (стендовый доклад).
15. I.I. Leonidov, V.G. Zubkov, N.V. Tarakina, L.L. Surat, A.P. Tyutyunnik, **I.V. Baklanova**, **L.A. Perelyaeva**, O.V. Koryakova. Structure and Luminescent Properties of Calcium and Manganese Rare-Earth Tetrametagermanates. European Conference on Lasers and Electro-Optics and the European Quantum Electronics Conference (CLEO®/Europe-EQEC-2009). 14-19 June 2009, Munich, ce.p.9-mon., p. 46.
16. H.A. Duarte, L. Guimarres, **A.N. Enyashin**, T. Heine, G. Seifert "Structural Properties of Aluminosilicate Nanotubes" // Abstracts of 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics DFT09 – Lyon, France, 31 August – 04 September 2009, P. P803.
17. **(Устный доклад - A.N. Enyashin)**, H. Manzano, A. Ayuela "Mechanical Properties of Imogolite Nanotubes" // Abstracts of Workshop on Inorganic Nanotubes: Experiment and Theory – San-Sebastian/Donostia, Spain, 2-4 September 2009, P. 36.
18. **A.N. Enyashin**, L. Guimarres, H.A. Duarte, T. Heine, G. Seifert "Structure and Stability of Aluminosilicate Nanotubes" // Abstracts of Workshop on Inorganic Nanotubes: Experiment and Theory – San-Sebastian/Donostia, Spain, 2-4 September 2009, P. 27.
19. **A.N. Enyashin**, **A.L. Ivanovskii** "Nanotubes of Polytitanic Acids" // Abstracts of Workshop on Inorganic Nanotubes: Experiment and Theory – San-Sebastian/Donostia, Spain, 2-4 September 2009, P. 32.
20. G. Seifert, T. Lorenz, **A. Enyashin** "The Influence of Defects in Inorganic Nanotubes on Electronic and Mechanical Properties" // Abstracts of Workshop on Inorganic Nanotubes: Experiment and Theory – San-Sebastian/Donostia, Spain, 2-4 September 2009, P. 26.
21. H. Manzano, J.S. Dolado, A. Ayuela, **A.N. Enyashin**, G. Seifert "Structure and stability in nanotubes made of cementitious materials" // Abstracts of Workshop on Inorganic Nanotubes: Experiment and Theory – San-Sebastian/Donostia, Spain, 2-4 September 2009, P. 29-30.
22. H. Manzano, J.S. Dolado, A. Ayuela, **A.N. Enyashin**, G. Seifert "Calcium hydroxide nanotubes" // Abstracts of Workshop on Inorganic Nanotubes: Experiment and Theory – San-Sebastian/Donostia, Spain, 2-4 September 2009, P. 38.
23. L. Guimarres, **A.N. Enyashin**, G. Seifert, H.A. Duarte "Aluminosilicate nanotubes – Imogolite and Halloysite" // Abstracts of 11th International Conference on Advanced Materials – Rio de Janeiro, Brazil, 20-25 September 2009, P. BB583.
24. **Бакланова Я.В.**, Максимова Л.Г., **Денисова Т.А.** Синтез и физико-химические свойства высокодисперсных порошков состава H₂MO₃ (M = Ti, Zr) // IX Международная научная конференция «Химия твердого тела: монокристаллы, наноматериалы, нанотехнологии» Сборник трудов. Кисловодск. 2009. С.234-235.
25. H.A. Duarte, T. Heine, G. Seifert, **A.N. Enyashin**, L. Guimarres "Structural properties of aluminosilicate nanotubes: A SCC-DFTB study" // Resúmenes del XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expreiyn Latina (QUITEL /CHITEL 2009), San Andrés, Colombia, Sept. 18–22, 2009.

26. Komova O. V*, Ozerova A. M*, Simagina V. I., Netskina O. V*, G.V. Odegova*, **Kellerman D. G.**, Ishchenko* A. V., Rudina N. A*. The study of Co-based catalysts activation under action of reaction media of NaBH_4 hydrolysis. "The Book of Abstracts of VIII International Conference MECHANISMS OF CATALYTIC REACTIONS", Новосибирск, 29 июня 2009 г. — 2 июля 2009 г.
27. **A. Semenova, D. Kellerman** and A. Markov. Electrical and Magnetic Properties of the $\text{Li}_{0.42}\text{Na}_{0.36}\text{CoO}_2$. 216th ECS Meeting in Vienna, Austria, 4-9 october 2009,; Meeting Abstracts. Abstract Number 82
28. N. Mukhina, V. Gorshkov and **D. Kellerman**. Synthesis and Transport Properties of $\text{LiMn}(\text{VO}_4)_x(\text{PO}_4)_{1-x}$ ($x = 0.01 - 0.1$) Solid Solutions. 216th ECS Meeting in Vienna, Austria, 4-9 october 2009,; Meeting Abstracts. Abstract Number 36
29. V. Gorshkov, N. Mukhina, B. Tsarev and **D. Kellerman**. Electronic Conductivity Control in Lithium Titanate. 216th ECS Meeting in Vienna, Austria, 4-9 october 2009,; Meeting Abstracts. Abstract Number 463
30. С.В.Наумов, Б.А.Гижевский, Н.В.Костромитина, А.М.Пацелов, В.Г.Шеменев, **Д.Г.Келлерман**. Нанокерамика и нанопорошок CuO , полученные методами ударно-волнового воздействия размолот в мельнице. Новое в магнетизме и магнитных материалах. Сб.трудов XXI Международной конференции 28 июня-4 июля 2009, Москва, ГС-25
31. Овечкина Н.А., Галахов В.Р., Гижевский Б.А., Taubitz K, Neumann M, **Семенова А.С., Келлерман Д.Г.**, Молодцов С.Л. Валентные сосияния ионов Со в наноструктурном LiCoO_2 , полученным методом вращения под давлением. Третья Всероссийская конференция по наноматериалам НАНО 2009. Тезисы докладов. Екатеринбург 20-24 апреля 2009, стр.215
32. **V. Ivanovskaya**, A. Zobelli, D. Teillet-Billy, N. Rougeau, V.Sidis. «Theoretical study of hydrogen interaction with defective graphitic like surfaces» // Carbon09, June 14-19, 2009, Biarritz, France
33. **V. Ivanovskaya**, A. Zobelli, O. Stephan, P.R. Briddon and C. Colliex "BN Domains Included into Carbon Nanotubes: Role of Interface" 11th conference of the French society of microscopy SFMu-2009, 22-26 Juin 2009, Paris, France
34. **V.V. Ivanovskaya**, Alberto Zobelli, Odile Stйphan, Patrick R. Briddon, and Christian Colliex. "Theoretical description of BN domains included into carbon nanotubes" // Nanotec09, Carbon Nanoscience and Nanotechnology, August 26-29th 2009 , Brussels, Belgium
35. N. Rougeau, **V. Ivanovskaya**, D. Teillet-Billy, A. Zobelli, D. Bachellerie, V. Sidis. "Interaction of atoms with graphitic-like surfaces for astrophysical applications" // DFT09, August31-September 04 2009, Lyon, France
36. Shaykhlislamova A.R., Yaroslavtsev A.B., **Zhuravlev N.A.** Synthesis and cation mobility of materials with Nasicon structure $\text{H}_{3-2x}\text{M}_{2-x}\text{Nb}_x(\text{PO}_4)_3$ // Thesis of The International Conference "Ion transport in organic and inorganic membranes". Krasnodar. 2009. P.179.
37. **(Устный доклад - Кузнецов М.В.) Кузнецов М.В.**, Кузнецова Т.В., **Разинкин А.С., Еняшин А.Н.**, Титов А.Н., **Ивановский А.Л.** Квазидвумерные слоистые структуры на основе TiSe_2 : электронная спектроскопия и СТМ-эксперимент. // Упорядочение в минералах и сплавах. 12 международный симпозиум, 10-16 сентября 2009, п.Лоо, Россия. Труды симпозиума. Том I. – Ростов н/Д: издательство СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2009, С.277-280.
38. **Разинкин А.С., Шалаева Е.В., Кузнецов М.В.** Изучение наноструктур $\text{NbO}_x/\text{Nb}(110)$ методами РФЭС, РФД и СТМ. // 2-ая Всероссийская Школа-конференция «Функциональные наноматериалы в катализе и энергетике», Екатеринбург, 2009, с. 109-110.
39. **Кузнецов М.В.** Электронная спектроскопия и СТМ-микроскопия как методы исследования поверхности твердых тел. **Пленарный доклад.** // 2-ая Всероссийская Школа-конференция «Функциональные наноматериалы в катализе и энергетике», Екатеринбург, 2009, с. 9.
40. T.V. Kuznetsova, V.I. Grebennikov, C. Taubitz, M. Neumann, M.V. Yakushev, **M.V. Kuznetsov**. Correlation between ARPES spectra and energy dispersion curves: Electronic structure of CuInSe_2 based compounds. //1 International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure ICES-11. October 5 - 10, 2009, Nara, Japan: Abstracts and Program. P. 123.
41. T.V. Kuznetsova, V.I. Grebennikov, C. Taubitz, M. Neumann, M.V. Yakushev, **M.V. Kuznetsov**, Electronic structure of CuIn_5Se_8 studied by angle-resolved photoemission spectroscopy. // 2nd UVSOR Conference on Low-Energy Photoemission of Solids using Synchrotron Radiation (LEPES 09). October 3rd - 5th, 2009 Okazaki, Japan: Abstracts and Program. - P. 12.

42. Блинова Ю.В., **Кузнецов М.В.**, Сударева С.В., Кузнецова Е.И., Криницина Т.П. Романов Е.П. Наноструктура нестехиометрического сверхпроводящего соединения $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6,8}$ после низкотемпературного распада // Тезисы докладов Третьей всероссийской конференции по наноматериалам НАНО 2009. Екатеринбург, 2009. С. 419-421.
43. Медведева И.В., Уймин М.А., Мысик А.А., Бызов И.В., Щеголева Н.Н., Гавико В.С., Ермаков А.Е. Линников О.Д., Родина И.В., **Переляева Л.А., Кузнецов М.В.** Применение наноразмерного магнетита в качестве сорбента ионов шестивалентного хрома из водного раствора. Международная конференция по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов. Тезисы докладов. Томск, 2009, с. 440-441.
44. V.S. Kiiko , **I.R. Shein** , Yu.N. Makurin, M.A. Gorbunova, **A.L. Ivanovskii** / The effect of Ti impurities on the electronic and magnetic properties of BeO // The Fifth China International Conference on High-Performance Ceramics (CICC-6). China, 2009. Conference Paper ID: D98. P. 189-200.