

Лаборатория квантовой химии и спектроскопии

(Ивановский А. Л./Кузнецов М.В.)

ноябрь 2011- ноябрь 2012

МОНОГРАФИИ

ОБЗОРЫ

1. **A.L. Ivanovskii, N.I. Medvedeva, A.N. Enyashin.** “*Ab initio* prediction of structural, electronic and mechanical properties of Ti_3SiC_2 ” *Chapter 10 in book: “MAX Phases: Microstructure, Properties and Applications”* (Eds. J. Low, Y. Zhou), Nova Sci. Publ., N.Y., 2012, pp. 183-203.
2. **А.Л. Ивановский.** «Графеновые и графеноподобные материалы» // **Успехи химии**, Т. 81, № 7, с. 571 - 605 (2012)

СТАТЬИ В ЗАРУБЕЖНЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** «Structural, electronic properties and inter-atomic bonding in layered chalcogenide oxides LaMChO (where $\text{M} = \text{Cu, Ag}$, and $\text{Ch} = \text{S, Se}$) from FLAPW-GGA calculations” // **Solid State Sci.** V. 14, No. 1, P. 89-93 (2012)
2. P. Wagner, C.P. Ewels, **V.V. Ivanovskaya**, P.R. Briddon, A. Pateau, B. Humbert. “Ripple edge engineering of graphene nanoribbons” // **Phys. Rev. B**, V. 84, No. 13, art. 134110 (2011)
3. D. Teillet-Billy, N. Rougeau, **V.V. Ivanovskaya**, V. Sidis. “Interaction of Atoms with Graphenic-Type Surfaces for the Chemistry of the Interstellar Medium: New Properties of H Dimers on the Surface”. // **Intern. J. Quantum Chem.**, V. 111, No. 15, P. 4504-4504 (2011)
4. A. Zobelli, **V. Ivanovskaya**, P. Wagner, I. Suarez-Martinez, A. Yaya, C.P. Ewels. “A comparative study of density functional and density functional tight binding calculations of defects in graphene” // **phys. status solidi B**, V.249, No. 2, P. 276-282 (2012)
5. **D.V. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “The influence of oxygen deficiency on structural and electro-nic properties of superconducting $(\text{Fe}_2\text{As}_2)(\text{Sr}_4\text{V}_2\text{O}_{6-x})$ ” // **J. Mater. Sci.**, V.47, No.8, P. 3663-3668 (2012)
6. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural, electronic, magnetic and elastic properties of tetragonal layered diselenide KCo_2Se_2 from first principles calculations” // **Physica B**. V. 407, No. 2. P. 271-275 (2012)
7. **A.S. Semenova**, R. F. Samigullina, **E. V. Shalaeva**, N. I. Kurov, **D. G. Kellerman**. ”Studies on Formation and Decomposition of the Layered Cobaltite $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{CoO}_2$ ” // **Intern. J. Inorgan. Chem.**, doi:10.1155/2011/649183
8. Simagina V.I., Komova O.V., Ozerova A.M., Netskina O.V., Odegova G.V., **Kellerman D.G.**, Bulavchenko O.A., Ishchenko A.V. Cobalt oxide catalyst for hydrolysis of sodium borohydride and ammonia borane.// **Applied Catalysis A: General**. V. 394. P. 86–92 (2011)
9. **D.G. Kellerman, E.V. Shalayevea**, V.S. Gorshkov, B.A. Tsaryev, E.G. Vovkotrub. “Structure peculiarities of carbon-coated lithium titanate: Raman spectroscopy and electron microscopic study”// **Solid State Sci.**, V. 14, P. 74-79 (2012).
10. В.Н. Красильников, О.И. Гырдазова, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**, Е.Ф. Жилина, Э.Г. Вовкотруб. «Строение и люминесцентные свойства наноструктурных твердых растворов $\text{Sc}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{CH}_3\text{COO})_3$ » // **Теор. эксперим. химия**, Т. 48. № 2. 2012. С. 102-106.
11. **A.S. Semenova, E.V. Zabolotskaya, D.G. Kellerman** “Magnetic properties of Ca-doped “ $\text{Li}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ ”” // **Chem. Phys. Lett.**, 533 (2012) 60–64
12. **Ya V. Baklanova, A.V. Ishchenko, T.A. Denisova**, L.G. Maksimova, B.V. Shulgin, V.A. Pustovarov, L.V. Viktorov “Photo- and radioluminescence of lithium hafnate Li_2HfO_3 ” // **Optical Materials**, V. 34,

- P. 1037–1041 (2012).
13. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “*Ab initio* probing of the magnetic and electronic properties of ThCr₂Si₂-like charge-balanced KFeAgTe₂” // **J. Supercond. Novel Magnet.**, V.25, No. 2, P. 151-154 (2012).
 14. **A.N. Enyashin**, L. Yadgarov, L. Houben, I. Popov, M. Weidenbach, R. Tenne, M. Bar-Sadan, G. Seifert “New Route for Stabilization of 1T-WS₂ and MoS₂ Phases” // **J. Phys. Chem. C**, V. 115, P. 24586-24591 (2011).
 15. L. Yadgarov, R. Rosentsveig, G. Leituss, A. Albu-Yaron, A. Moshkovich, V. Perfilyev, R. Vasic, A.I. Frenkel, **A.N. Enyashin**, G. Seifert, L. Rapoport, R. Tenne “Controlled Doping of MS₂ (M = W, Mo) Nanotubes and Fullerene-like Nanoparticles” // **Angew. Chem. Intern. Ed.**, V. 51, № 5, P. 1148-1151 (2012).
 16. E. Erdogan, I. Popov, **A.N. Enyashin**, G. Seifert “Transport Properties of MoS₂ Nanoribbons: Edge Priority” // **Eur. Phys. J. B**, V. 85, P. 33(1-4) (2012).
 17. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “Atomic structure, comparative stability and electronic properties of hydroxylated Ti₂C and Ti₃C₂ nanotubes” // **Comput. Theor. Chem.** V. 989, P. 27-32 (2012).
 18. **A.N. Enyashin**, P.Yu. Glazyrina “On the crystallization of polymer composites with inorganic fullerene-like particles” // **Phys. Chem. Chem. Phys.**, V. 14, P. 7104-7111 (2012).
 19. H. Manzano, **A.N. Enyashin**, J.S. Dolado, A. Ayuela, J. Frenzel, G. Seifert “Do Cement Nanotubes Exist?” // **Adv. Mater.**, V. 24, P. 3239-3245 (2012).
 20. V.D. Zhuravlev, A.P. Tyutyunnik, V.G. Zubkov, **L.A. Perelyaeva, I.V. Baklanova**, A.L. Blinova. «Synthesis and crystal structures of new oxyapatites BiCa_{4-x}La_x(VO₄)_{3-x}(GeO₄)_xO, x=1-3» // **Journal of Solid State Chemistry** 194 (2012) 32-36.
 21. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Trends in structural, electronic properties and Fermi surface topology of 15 tetragonal ThCr₂Si₂-type phases AFe₂Ch₂, where A = Li, Na, K, Rb, and Cs; Ch = S, Se, and Te, as parent systems of new ternary iron-chalcogenide superconductors” // **Comput. Mater. Sci.**, V.60. No 1, P. 1-6 (2012)
 22. **Ryzhkov M.V., Ivanovskii A.L.**, Delley B.T. “Electronic structure of endohedral fullerenes An@C₂₈ (An = Th – Md)” // **Comput. Theor. Chem.**, V. 985, P. 46-52 (2012)
 23. **Ивановский А.Л.** «Микротвердость соединений рения с бором, углеродом и азотом» // **Сверхтвердые материалы**, № 2, с. 3-9 (2012).
 24. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural, electronic, elastic properties and chemical bonding in LaNi₂P₂ and LaNi₂Ge₂ from first principles calculations” // **Intermetallics**, V. 26, P. 1-7 (2012).
 25. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural, elastic, electronic properties and stability trends of 1111-like silicide arsenides and germanide arsenides MCuXAs (M = Ti, Zr, Hf; X = Si, Ge) from first principles” // **J. Alloys Comp.**, V. 533, P. 71-78 (2012)
 26. **D.G. Kellerman**, Yu.G. Chukalkin, N.A. Mukhina, V.S. Gorshkov, **A.S. Semenova** A.E. Teplykh. Some aspects of antiferromagnetic ordering in LiMnPO_{0.85}V_{0.15}O₄: neutron diffraction and dc-magnetization studies. **J. Magnetism Magnetic Materials**, DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2012.05.037> V. 324, P. 3181-3188 (2012)
 27. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Planar nano-block structures Ti_{n+1}Al_{0.5}C_n and Ti_{n+1}C_n (n = 1, and 2) from MAX phases: structural, electronic properties and relative stability from first principles calculations” // **Superlattices and Microstructures**, V. 52, P. 147-157 (2012)
 28. **E.V. Shalaeva, N.I. Medvedeva.** “First-principles study of the effect of iron on the crystal structure, stability and chemical bonding in the β-based AlCu ordered η₂-phase and the pretransition state of a solid solution” // **Phil. Mag.** V.92. N.13. P. 1649-1662 (2012).
 29. O.L. Andreev, A.A. Raskovalov, B.D. Antonov, **N.A. Zhuravlev, T.A. Denisova.** “Anticomposite effect” in the system glassy LiPO₃/crystalline MgO” // **Solid State Ionics**, Vol. 220, P. 12-17 (2012).
 30. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Impurity - induced magnetization of layered semiconductor LaCuSeO as predicted from first-principles calculations” // **J. Supercond. Novel Magnetism** V 26, Iss. 4, P. 1509-1513 (2012)
 31. **I.R. Shein, V.V. Bannikov, A.L. Ivanovskii.** “*Ab initio* prediction of new 3D-like phases ThCuSiAs, ThCuGeAs and their structural, mechanical, and electronic properties” // **J. Mater. Sci.**, V. 47, Iss. 18, P. 6741-6747 (2012)
 32. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Graphene-like titanium carbides and nitrides Ti_{n+1}C_n, Ti_{n+1}N_n (n = 1, 2 and

- 3) from de-intercalated MAX phases: First-principles probing of their structural, electronic properties and relative stability" // **Comput. Mater. Sci.**, V 65, P.104-114 (2012)
33. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** "Fluorinated sp^2 graphene allotropes: structure, stability, and electronic properties" // **Chem. Phys. Lett.**, V. 545, p. 78-82 (2012)
34. **D.V. Suetin, A.L. Ivanovskii**. "Electronic, magnetic properties and chemical bonding in layered oxychalcogenides $Ca_4Fe_2Cu_2S_2O_6$ and $Ca_4Fe_2Cu_2Se_2O_6$ from first principles calculations" // **J. Solid State Chem.**, V. 194, p 100-105 (2012)
35. **D.V. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. "Electronic, magnetic properties and correlation effects in the layered quaternary iron oxyselenide $Na_2Fe_2Se_2O$ from first principles" // **Solid State Commun.**, V. 152, No. 21, P. 1969–1972 (2012).
36. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. "Electronic band structure of pseudo-binary AlB_2 -like hexagonal silicides $SrNi_xSi_{2-x}$ as novel low- T_C superconductors" // **Physica B**, V. 407, N. 23, P. 4592–4594 (2012)
37. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. "Electronic, optical properties and chemical bonding in six novel 1111-like chalcogenide fluorides $AMChF$ ($A = Sr, Ba$; $M = Cu, Ag$; and $Ch = S, Se, Te$) from first principles calculations" // **J. Solid State Chem.**, V. 196, P. 601-606 (2012)
38. **M. V. Kuznetsov, I. I. Ogorodnikov, A.S. Vorokh**, A. S. Rasinkin, A. N. Titov, Characterization of 1T-TiSe₂ Surface by means of STM and XPD Experiments and Model Calculations. // **Surface Science**, V.606, N 23-24, 1760-1770 (2012).
39. A.S. Shkvarin, Yu.M. Yarmoshenko, M.V.Yablonskikh, N.A. Skorikov, A.I. Merentsov, **M.V.Kuznetsov**, A.N. Titov, M_xTiSe_2 ($M = Cr, Mn, Cu$) electronic structure study by methods of resonance X-ray photoemission spectroscopy and X-ray absorption spectroscopy. // **J. Phys. Chem. Solids**, V.73, № 12, 1562-1565 (2012).
40. T. V. Kuznetsova, V. I. Grebennikov, H. Zhao, C. Derks, C. Taubitz, M. Neumann, C. Persson, **M. V. Kuznetsov**, I. V. Bodnar, R. W. Martin, and M. V. Yakushev "A photoelectron spectroscopy study of the electronic structure evolution in $CuInSe_2$ -related compounds at changing copper content ". // **Appl. Phys. Lett.**, V. 101, 111607 (2012).
41. Vadim R. Galakhov , Anna Buling , Manfred Neumann , Natalia A. Ovechkina , Alexei S Shkvarin , **Anna S. Semenova** , Mikhail A. Uimin , Anatolii Ye. Yermakov , Ernst Z Kurmaev , Oleg Y. Vilkov , and Danil W Boukhvalov. Carbon States in Carbon-Encapsulated Nickel Nanoparticles Studied by Means of X-Ray Absorption, Emission, and Photoelectron Spectroscopies// **J. Phys. Chem. C**, 2011, 115 (50), pp 24615–24620
42. **N. I. Medvedeva**, A. S. Murthy, V. L. Richards, D. C. Van Aken, J. E. Medvedeva, // **J. Mater. Sci.**, September 2012 DOI 10.1007/s10853-012-6884-2
43. **Ryzhkov M.V.**, Delley B.T. "Geometry, electronic structure and magnetic ordering of iron-carbon nanoparticles" // **Theor. Chem. Accounts**, V. 131, P. 1144-1161 (2012).
44. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** "Атомная структура, стабильность и электронные свойства фторированных алмазоподобных углеродных нанослоев"// **Теор. эксперим. химия**, Т. 48, № 5, с. 303-307 (2012).
45. Yakushev M.V., Volkov V.A., Mudryi A.V., **Ogorodnikov I.I.** "Incorporation of hydrogen in $CuInSe_2$: Improvements of the structure" // **J. Vac. Sci. Technol. A**, 2011. C. 051201.
46. М.А. Мелкозерова, В.Н. Красильников, О.И. Гырдазова, **Е.В. Заболоцкая, Е.В. Шалаева**, Р.Ф. Самигуллина. Природа дефектов в нанокристаллическом оксиде цинка с трубчатой морфологией частиц // **Теор. эксперимент. химия**. 2012. Т.48. №3. С.139-142. (Украина, Киев).
47. **V. Zhukov** and E. Chulkov, "Ab initio approach to the rate of radiative electron trapping and electron-hole recombination in B-, C-, and N-doped anatase" // **Phys. Status Solidi** 249(5), 1063 (2012).
48. **V.P. Zhukov**, V.G. Tyuterev, and E. Chulkov, "Electron-phonon relaxation and excited electron distribution in zinc oxide and anatase" // **J. Phys.: Condens. Matter** 24, 405802 (2012).
49. **V. Zhukov, I. Shein**, and V. Zainullina, "Electronic band structure, optical absorption and photocatalytic activity of anatase doped with bismuth or carbon" // **J. Alloys Compounds** 548, 46 (2013).
50. Kurbatova L.D., Slepukhin P.A., Kurbatov D.I., **Zabolotskaya E.V.** Extraction of vanadium (IV) with di-2-ethylhexylphosphoric acid // **Phosphorus, Sulfur, and Silicon and related Elements**. 2012. V. 187. # 9. P. 1032-1037.

51. A.P. Tyutyunnik, B.V. Slobodin, R.F. Samigullina, B. Verberck, **N.V. Tarakina** / $K_2CaV_2O_7$: a pyrovanadate with a new layered type of structure in the $A_2BV_2O_7$ family / **Dalton Trans.**, 2012, DOI: 10.1039/C2DT31246H.
- 52.

СТАТЬИ В ОТЕЧЕСТВЕННЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Еняшин А.Н.**, Бамбуров В.Г., **Ивановский А.Л.** “Стабильность, структурные, упругие и электронные свойства 3D (sp^3) аллотропов углерода по данным DFTB расчетов” // **Доклады АН**, сер. физ. химия, Т. 442, № 1, с. 63-66 (2012)
2. **Шейн И.Р.**, **Ивановский А.Л.** «*Ab initio* probing of the electronic band structure and Fermi surface of fluorine- doped WO_3 as a novel low- T_C superconductor»// **Письма ЖЭТФ**, Т. 95, № 2, с. 72-75 (2012)
3. **Ивановский А.Л.** «Микротвердость боридов, карбидов и нитридов осмия» // **Материаловедение**, № 1, с. 7-10 (2012).
4. **Банников В.В.**, **Ивановский А.Л.** “ Влияние примесей Mn, Fe и Co на электронные и магнитные свойства слоистых оксихалькогенидов $LaCuSO$ и $LaCuSeO$ по данным FLAPW-GGA расчетов” // **Физика твердого тела**, Т. 54, № 6, с. 1048-1052 (2012)
5. О. И. Гырдазова, В.Н. Красильников, **Е.В. Шалаева**, **М.В. Кузнецов**, А.П. Тютюнник. « Синтез и структура квазиодномерного (1D) оксида цинка, допированного марганцем» // **ЖНХ**, Т. 57, № 1, с.78-85 (2012).
6. **Е.В. Шалаева**, А.Ф. Прекул, В.В. Хиллер, С.З. Назарова. «Планарные дефекты икосаэдрической фазы в квазикристаллообразующих сплавах Al-Cu-Fe» // **ФТТ**, Т. 54, с.657-665 (2012).
7. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Mechanical Properties and Electronic Structure of Zircon: Ab Initio FLAPW-GGA Calculations” // **Inorganic Materials: Applied Research**, 2012, Vol. 3, No. 1, pp. 7–10.
8. **А.С. Ворох**, С. З. Назарова, Н. С. Кожевникова "Влияние размерно-структурного фактора на магнитную восприимчивость наночастиц сульфида кадмия CdS " // **Физика твердого тела**, Т.54, вып. 6, с.1228-1233 (2012)
9. **И.И. Огородников**, **А.С.Ворох**, А.Н. Титов, **М.В. Кузнецов.** "Атомная структура поверхностного слоя 1T-TiSe2 по данным фото- и Оже-электронной голографии" // **Письма в ЖЭТФ**, Т.95, вып.7, с.414-422 (2012)
10. А.С. Разинкин, **И.И. Огородников**, А.Н.Титов, **М.В. Кузнецов** "Структурные дефекты на поверхности 1T-TiSe2: эксперимент и модельные расчеты фотоэлектронной дифракции" // **Известия РАН. Серия физическая**, Т. 76, № 7, С. 943-946 (2012)
11. Е.И.Андрейков, М.В.Зорин, И.С.Амосова, **М.В.Кузнецов.** “Получение полукоксов с повышенным содержанием азота сокарбонизацией различных пеков с полиакрилонитрилом”. // **Журнал прикладной химии**, Т.84, Вып.12, с.2004-2008 (2011).
12. Г. С. Захарова, **М. В. Кузнецов**, Синтез и свойства микростержней $(VO)_{0.09}V_{0.18}Mo_{0.82}O_3 \cdot 0.54H_2O$. // **ЖНХ**, 2011, том 56, № 12, с. 1–6.
13. **М.В. Кузнецов**, О.Д. Линников, И.В. Родина. “РФЭ-спектры поверхности нанопорошков магнетита после сорбции хрома (VI) из водных растворов” // **Неорганические материалы**, Том 48, № 2, С. 1–7 (2012).
14. А.Б. Шишмаков, Ю.В. Микушина, О.В. Корякова, М.С. Валова, **Н.А. Журавлев**, Л.А. Петров “Бинарные ксерогели ZrO_2-SiO_2 : синтез и свойства” // **ЖНХ**, 2012, том 57, № 1, с. 27-30.
15. Т.И. Красненко, **Н.А. Журавлев**, **Л.А. Переляева** “Исследование особенностей локальной структуры $Zn_{2-2x}Cd_{2x}V_2O_7$ методами ЯМР и ИК спектроскопии” // **Известия РАН. Серия физическая**. 2012. Т. 76, № 3, с.461-463.
16. Вотяков С.Л., Щапова Ю.В., Хиллер В.В., Виноградова Н.С., Главатских С.П., Поротников А.В., Галахова О.Л., Вовкотруб Э.Г., Стрекаловский В.Н., **Ивановский А.Л.**, **Кузнецов М.В.**, **Рыжков М.В.**, **Шалаева Е.В** “Спектроскопия и физика моноката: состояние и перспективы

использования в решении геохронологических проблем Урала” // **Литосфера**, № 4, с. 156-170 (2012)

17. **Банников В.В., Ивановский А.Л.** “Фазовые переходы полупроводник - металл и полупроводник - магнитный полуметалл в слоистом SrAgSeF при допировании атомами кислорода и азота.” // **Письма в ЖТФ**, Т.33, № 22, с. 71-77 (2012).
18. **Я.В. Бакланова**, Н.В. Таракина, Л.Г. Максимова, **Т.А. Денисова**, **Н.А. Журавлев**, К.Н. Михалев, А.Л. Бузлуков “Зависимость реакционной способности титаната лития от дефектности кристаллической структуры” // **Известия РАН. Серия физическая**. 2012. Т. 76, № 7, с. 899-901.
19. Б.В. Слободин, А.В. Ищенко, Р.Ф. Самигуллина, Б.В. Шульгин, М.А. Мелкозерова, **Е.В. Заболоцкая**. Структура и люминесценция $\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{VO}_3)_4:\text{Mn}^{2+}$ // **Неорганические материалы**. 2012. Т.48. №5. С.606-610.
20. В.Г.Шевченко, **М.В.Кузнецов**, С.А.Бибанаева, А.В.Конюкова, И.А.Чупова, И.Н.Латош, В.А.Кочедыков, Д.А.Еселевич “Поверхностная сегрегация кальция и ее влияние на кинетику окисления порошков сплавов на основе алюминия”. // **Физикохимия поверхности и Защита материалов**, Т.48, №5, С.1-6 (2012).
21. Е. И. Кузнецова, **М. В. Кузнецов**, Ю. В. Блинова, Т. П. Криницина, С. В. Сударева, Е. П. Романов, Д. Н. Раков, Ю. Н. Белотелова “Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия керамик композитов Bi,Pb-2223/Ag, отожженных в атмосфере с пониженным содержанием кислорода (O_2+N_2)”. // **Физика металлов и металловедение**. Т.113, №4, С.387-393 (2012).
22. Туленин С.С., Марков В. Ф. , Федорова Е. А. , Левашова Е. В., Маскаева Л. Н., **Кузнецов М.В.** “Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия пленок CuGaSe_2 , полученных гидрохимическим осаждением.” // **Бутлеровские сообщения**. Т.30. №4. С.105-112 (2012).
23. Федорова Е. А. , Туленин С. С. , Маскаева Л. Н. , **Кузнецов М. В.**, Чуфаров А. Ю., Марков В.Ф. “Гидрохимический синтез пленок халькогенидов металлов. Обогащение пленок $\text{Cu}_x\text{In}_{1-x}\text{SeYO}_{1-y}$ индием методом ионообменного замещения.” // **Бутлеровские сообщения**. Т.30. №6. С.144-149 (2012).
24. Марков В.Ф., Туленин С.С., Маскаева Л.Н., **Кузнецов М.В.**, Барбин Н.М. “Состав и субмикронная структура химически осажденных пленок $\text{Cu}_2\text{Se-In}_2\text{Se}_3$.” // **Письма в ЖТФ**. 2012. Т.38. №6. С. 77–82.
25. **Рыжков М.В.**, Дэлли Б. “Пространственная структура и стабильность наночастиц Mo_nSi_m // **ЖСХ**, Т.53, № 2, с. 213-218 (2012).
26. Кожевникова Н.С., Горбунова Т.И., **Ворох А.С.**, Бажин Д.Н., Запевалов А.Я., Салоутин В.И., Ремпель А.А., Чупахин О.Н. Агрегативная устойчивость коллоидно-дисперсной системы наночастицы CdS-H₂O в присутствии поверхностно-активных веществ. // **Доклады Академии наук**. 2012. Т. 443. № 3. С. 321-325.
27. О.И. Гырдазова, В.Н. Красильников, М.А. Мелкозерова, **Е.В. Шалаева**, **Е.В. Заболоцкая**, Л.Ю. Булдакова, М.Ю. Янченко, В.Г. Бамбуров. Синтез, микроструктура и собственная дефектность фотоактивных твердых растворов $\text{Zn}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}$ ($0 \leq x \leq 0.1$) с трубчатой формой агрегатов // **Доклады Академии наук**, 2012. Т.447. №3. С.292–295.
28. Костенко М. Г., Лукоянов А. В., **Жуков В. П.**, Ремпель А. А. “Электронная структура неупорядоченного монооксида титана в зависимости от стехиометрии” // **Письма в ЖЭТФ**. 2012. Т.95. № 12. С.728-732.
29. Костенко М. Г., Лукоянов А. В., **Жуков В. П.**, Ремпель А. А. “Влияние дальнего порядка в расположении вакансий на электронную структуру монооксида титана $\text{TiO}_{1.0}$ ” // **Письма в ЖЭТФ**. 2012. Т.96. № 8. С.557-561.
30. **В. Жуков**, В.Г. Тютерев, “Электронная зонная структура и распределение возбужденных электронов в зоне проводимости анатаза, легированного бором, азотом, углеродом.” // **Физика твердого тела**, 54(11), 27 (2012).
31. **Банников В.В., Ивановский А.Л.** “Ab initio search of novel bipolar magnetic semiconductors: layered YZnAsO doped with Fe and Mn” // **Письма в ЖЭТФ**, Т. 96, № 11, С. 821-824 (2012)

ПАТЕНТЫ

1. **Денисова Т.А., Бакланова Я.В.**, Максимова Л.Г. “Способ получения порошка цирконата лития” Патент № 2440298 от 20. 01.2012.
2. Гырдасова Е.В., **Шалаева Е.В.**, Красильников В.Н., “Способ получения нанотрубок оксида цинка (варианты)” Патент № 2451579 от 27.05.2012.

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

1. **A.N. Enyashin**, L. Yadgarov, L. Houben, I. Popov, M. Weidenbach, R. Tenne, M. Bar-Sadan, G. Seifert “New route for stabilization of 1T-WS₂ and MoS₂ phases” // **cond-mat.arXiv**: 1110.3848 (2011)
2. **V.P. Zhukov**, V.G. Tyuterev, E.V. Chulkov. “Electron-phonon relaxation and excited electron distribution in zinc oxide and anatase” // **cond-mat.arXiv**:/0436083 [cond-mat.mtrl-sci] 14 Mar 2012.
3. **D.V. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic, magnetic properties and correlation effects in the layered quaternary iron oxyarsenide Na₂Fe₂Se₂O from first principles” // **cond-mat.arXiv**: 1206.6182 (2012)
4. A. Zobelli, **V. Ivanovskaya**, P. Wagner, I. Suarez-Martinez, A. Yaya, C.P. Ewels “A comparative study of density functional and density functional tight binding calculations of defects in graphene”// **cond-mat.arXiv**: 1207.3194 (2012)
5. **V. Ivanovskaya**, P. Wagner, A. Zobelli, I. Suarez-Martinez, A. Yaya, C.P. Ewels “Graphene edge structures: Folding, scrolling, tubing, rippling and twisting”// **cond-mat.arXiv**: 1207.4935 (2012)
6. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic band structure, Fermi surface, and the effect of spin-orbit coupling for tetragonal low-temperature superconductor Bi₂Pd from first principles” // **cond-mat.arXiv**: 1208.1633 (2012)
7. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. *Ab initio* study of the elastic and electronic properties of tetragonal Th₂NiC₂”// **cond-mat.arXiv**: 1208.4456 (2012)
8. **A.N. Enyashin**, G. Seifert “Density-functional study of Li_xMoS₂ intercalates (0<=x<=1)”// **cond-mat.arXiv**: 1205.5220 (2012)
9. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “Fluorographynes: Stability, Structural and Electronic Properties”// **cond-mat.arXiv**: 1208.5315 (2012)
10. Т.И. Красненко, **Н.А. Журавлев**, М.В. Ротермель “Исследование регулярной и локальной структуры полиморфных модификаций Mn_{2(1-x)}Ni_{2x}V₂O₇” // 15-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах».–ОМА-15, Ростов-на-Дону, п.Лoo, 13-18 сентября 2012г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012.- 372 с., С.329-331.
11. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **В.П. Жуков, И.Р. Шейн, Л.А. Перелева**, О.И. Гырдасова. «Оптическое поглощение и электронная зонная структура диоксида титана, допированного редкоземельными элементами» // 15-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов», ОДРО-15, Ростов-на-Дону, п.Лoo, 7-12 сентября 2012г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012.- 394 с., С.167-170.
12. М.А. Мелкозерова, В.Н. Красильников, **И.В. Бакланова**, О.И. Гырдасова, **Е.В. Заболоцкая**, Р.Ф. Самигуллина. «Синтез и дефектная структура, допированного углеродом диоксида титана» // 15-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов», ОДРО-15, Ростов-на-Дону, п.Лoo, 7-12 сентября 2012г.: Труды симпозиума.- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012.- 394 с., С.187-190.
13. Мелкозерова М.А., Красильников В.Н., Гырдасова О.И., **Шалаева Е.В.**, Булдакова Л.Ю., Янченко М.Ю., **Заболоцкая Е.В.** Влияние природы допанта на микроструктуру, дефектность и фотокаталитическую активность наноструктурированных твердых растворов Zn_{0.95}M_{0.05}O (М – Fe, Co, Ni, Mn, Cu) // XV Международный междисциплинарный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”. Сборник трудов. Сочи. 2012. С.166-169.
14. Гырдасова О.И., Мелкозерова М.А., Красильников В.Н., **Кузнецов М.В., Заболоцкая Е.В.**, Булдакова Л.Ю., Янченко М.Ю. Синтез, собственная дефектность и фотокаталитическая

- активность твердых растворов $Zn_{1-x}V_xO$ ($0 \leq x \leq 0.03$) // XV Международный междисциплинарный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”. Сборник трудов. Сочи. 2012. С.89-92.
15. (Устный доклад) И.И.Огородников, С.В.Ворох, М.В.Кузнецов, А.Н.Титов. «Реконструкция 3D-атомной структуры поверхности 1T-TiSe₂ методом рентгеновской фотоэлектронной голографии» // 15-й Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов», ODPO-15, Ростов-на-Дону, п.Лоо, 7-12 сентября 2012г.: Труды симпозиума.- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012.- 394 с., С.175-179.
 16. С.С.Зырянов, М.В.Кузнецов, Ф.Г.Нешов, О.В.Рябухин “Исследование поверхности стали облученной протонами в йодной среде”. // Проблемы спектроскопии и спектрометрии: вузовско-академический сборник научных трудов. Екатеринбург: УрФУ, 2011. Вып. 29. С.73-81.
 17. Туленин С.С., Марков В.Ф., Маскаева Л.Н., Кузнецов М.В. “Определение условий получения тонких пленок CuInSe₂ гидрохимическим методом осаждения.” // VII Международная научно-практическая конференция «Перспективные направления науки и техники»: сборник – Пшемысль, Польша, 2011. Т.49. С.20–24.
 18. Н.И.Кадырова, Ю.Г.Зайнулин, А.П.Тютюнник, А.С.Семенова, Н.В.Мельникова, И.С.Устинова. Термобарический синтез, структура и свойства $DyxCu_3V_4O_{12}$ Труды международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-15 Ростов-на-Дону, п. Лоо 7-12 сентября 2012, стр 136
 19. N. I. Medvedeva, M. S. Park, D. C. Van Aken, and J. E. Medvedeva, Title: First-principles study of the Mn, Al and C distribution and their effect on the stacking fault energies in austenite, **cond-mat.arXiv: 1208.0310** (2012).
 20. Н.И. Медведева, “Механизм деформации в Mo_5SiB_2 ”, Тезисы докладов 15-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах», г. Ростов-на-Дону, 13-18 сентября 2012 г., с. 165. // XV Международный междисциплинарный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”. Труды симпозиума.- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012.- 394 с., С.165.
 21. А.А.Расковалов, О.Л.Андреев, Т.А.Денисова «Оценка подвижности катионов лития в композите аморфный $LiPO_3$ – кристаллический MgO методом ЯМР» в сб. материалов междунар. Конференции «Фундаментальные проблемы преобразования энергии в литиевых электрохимических системах», Краснодар, 2012, с. 276-278.
 22. Шалаева Е.В., Шапова Ю.В., Вотяков С.Л. “Наноразмерная структурно-фазовая гетерогенность монацита по данным просвечивающей электронной микроскопии” // Материалы Всероссийской научной конференции с международным участием «ГЕОДИНАМИКА, РУДНЫЕ МЕСТОРОЖДЕНИЯ И ГЛУБИННОЕ СТРОЕНИЕ ЛИТОСФЕРЫ. XV Чтения памяти академика А.Н. Заварицкого», 11–14 сентября 2012 г., г. Екатеринбург. Екатеринбург: Институт геологии и геохимии УрО РАН, 2012. 304 с. С.275-277.
 23. I.R. Shein, A.L. Ivanovskii. “Electronic band structure and Fermi surface for new layered superconductor $LaO_{0.5}F_{0.5}BiS_2$ in comparison with parent phase $LaOBiS_2$ from first principles” // **cond-mat.arXiv: 1211.3818** (2012)
 24. М.В. Рыжков, Б.Дэлли, С.В. Йю, Б.В.Чанг, Д.Тобин, А.В. Мирмельштейн “Химическая связь и атомные конфигурации плутония в молекулах и наноразмерных фрагментах гцк фазы металлического плутония” // 15-й Международный симпозиум «Упорядочение в минералах и сплавах».–ОМА-15, Ростов-на-Дону, п.Лоо, 13-18 сентября 2012г.: Труды симпозиума.- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2012.- 372 с., С.233-235.
 25. М.В. Рыжков, Б. Дэлли “Связывание ионов урана и плутония наночастицами оксида титана. Квантово-химические модели” // Труды международного симпозиума «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-15 Ростов-на-Дону, п. Лоо 7-12 сентября 2012, С.271.
 - 26.

ТЕЗИСЫ

1. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева**, Э.Г. Вовкотруб. Синтез и люминесцентные свойства $\text{Sc}_{2-2x}\text{Eu}_{2x}\text{O}_3$. Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 10.
2. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева**, Э.Г. Вовкотруб. Эмиссионные спектры твердых растворов $\text{Sc}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{CH}_3\text{COO})_3$ ($x= 0.01-0.1$). Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 11.
3. **Я.В. Бакланова**, **Т.А. Денисова**, **Н.В. Таракина**, Л.Г. Максимова, **И.В. Бакланова**. Синтез и физико-химические характеристики нанодисперсного оксигидроксида гафния. Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 13.
4. И.А. Гофман, В.Д. Журавлев, В.А. Пустоваров, **Л.И. Переляева**, **И.В. Бакланова**. Люминесцентная и колебательная спектроскопия молибдатов состава $\text{Pb}_{1-x}\text{A}_x\text{MoO}_4$ ($\text{A}=\text{Ca}, \text{Sr}$). Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 44.
5. **Банников В.В.**, **Шеин И.Р.**, **Ивановский А.Л.** «Эволюция электронных и магнитных свойств $\text{LaCu}_{1-x}\text{Fe}_x\text{SeO}$ в зависимости от концентрации допанта (Fe) по данным первопринципных зонных расчетов»// Там же, с. 14.
6. **Банников В.В.**, **Шеин И.Р.**, **Ивановский А.Л.** «Электронные и магнитные свойства YznAsO и LaCuSeO , легированных атомами sp элементов (B,C,N): ab initio моделирование» // Там же, с. 15.
7. **Еняшин А.Н.**, **Ивановский А.Л.** «Хемосорбаты бензойных кислот и пирокатехинов с поверхностью трититановой кислоты» // Там же, с. 55.
8. **Еняшин А.Н.**, **Ивановский А.Л.** «DFT моделирование нанотрубок карбида титана» // Там же, с. 56.
9. **(Устный доклад) Еняшин А.Н.**, Seifert G. «Моделирование фуллереноподобных частиц слоистых дихалькогенидов» // Там же, с. 57.
10. **Еняшин А.Н.**, Глазырина П.Ю. «О влиянии фуллереноподобных частиц на кристаллизацию в полимерных композитах» // Там же, с. 54.
11. **Суетин Д.В.**, **Шеин И.Р.**, **Ивановский А.Л.** «Влияние кислородных вакансий на свойства Fe-содержащих «42226» фаз по данным FLAPW GGA расчетов» // Там же, с. 171.
12. **Суетин Д.В.**, **Шеин И.Р.**, **Ивановский А.Л.** «Моделирование структурных, электронных и магнитных свойств «42226» фаз» // Там же, с. 172.
13. **Ивановский А.Л.**, Истомин П.В., Рябков Ю.И. «Оценки микротвердости MAX фаз с участием гафния и тантала» // Там же, с. 77.
14. **Я.В. Бакланова**, **Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, **Н.А. Журавлев**, К.Н. Михалев «ЯМР ^7Li в Li_2MO_3 ($\text{M} = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$)» Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 12.
15. А.В. Ищенко, **Я.В. Бакланова**, **Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, Б.В. Шульгин, В.А. Пустоваров «Фотолюминесценция Li_2HfO_3 » Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 83.
16. **(Устный доклад) Шалаева Е.В.**, **Медведева Н.И.**, Прекул А.Ф., Смирнова Е.О., «Планарные дефекты икосаэдрической фазы в сплавах Al-Cu-Fe: структура, механизмы образования, механические свойства» Смирнов С.В. Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 207.
17. Красильников В.Н., Гырдазова О.И., Мелкозерова М.А., **Шалаева Е.В.**, Булдакова Л.Ю., Янченко М.Ю., «Фотокатализаторы окисления на основе наноразмерного оксида цинка с трубчатой морфологией агрегатов», Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 104.
18. Мелкозерова М.А., Красильников В.Н., Гырдазова О.И., **Заболоцкая Е.В.**, **Шалаева Е.В.**, Булдакова Л.Ю., Янченко М.Ю., «Дефектная структура фотокатализаторов на основе наноразмерного оксида цинка», Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 122.

19. V.V. Pakhomova, P.Yu. Glazyrina, **(Oral presentation) A.N. Enyashin** «On the Crystallization of Polymer Composites with Inorganic Nanoparticles» // 4-th COINAP0 Topical Meeting “Composites of nanotubes and polymers: joining theoretical modeling with experimental investigations”, Ljubljana, Slovenia, 8-9 December, 2011, P. O6
20. **(Устный доклад) Е.В. Шалаева**, А.Ф. Прекул, Ю.В. Чернышев, Е.О. Смирнова, С.В. Смирнов “Фазовая стабильность икосаэдрической фазы Al-Cu-Fe и планарные дефекты: электронная микроскопия и наноиндентирование” // XXIV Российская конференция по электронной микроскопии, 29 мая-1 июня 2012, Черноголовка, с.167-168.
21. Poleshchuk O.Kh., Egorov N.B., **Ivanovskii A.L.** “ DFT study of isotopocally pure lead chalcogenides” // In: VIII Congress of Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA-2012, Barcelona, Book of Abstracts: P-MS-39.
22. **(Oral presentation) A.N. Enyashin**, G. Seifert “Capillary imbibition of molten Ga and In into MoS₂ nanotubes» // Transition Metal Chalcogenide and Halide Nanostructures Meeting TMCN12, Mainz, Germany, 2-4 July, 2012, P. 10
23. **Банников В.В., Шеин И.Р., Ивановский А.Л.**, Бамбуров В.Г. “Компьютерный дизайн новых материалов для спинтроники на основе слоистых «1111» фаз” // В сб.: XI Межд. конф. «Химия твердого тела: наноматериалы, нанотехнологии», Ставрополь, ФГБОУ ВПО «Сев.-кав. ГТУ», апрель, 2012, с. 188-190.
24. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.**, Бамбуров В.Г. «DF-TB моделирование структуры и электронных свойств новых графеноподобных нанокарбидов титана: Ti₂C И Ti₃C₂» // там же, с. 191-192.
25. Красильников В.Н., **Бакланова И.В., Переляева Л.А.**, Бамбуров В.Г. «Синтез и люминесценция наноразмерных твердых растворов Sc_{1-x}Ln_x(CH₃COO)₃» // там же, с. 194-196.
26. **Ивановский А.Л.** “Computational materials science of novel ternary layered superconductors A-Fe-Ch (where A are alkali metals, and Ch = S, Se,Te) and related systems” // В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч. 1, с.37-38
27. **(Устный доклад) Денисова Т.А., Бакланова Я.В.**, Максимова Л.Г., **Таракина Н.В.**, Михалев К.Н. «Влияние дефектов структуры на физико-химические свойства металлов лития Li₂MO₃ (M=Ti, Zr, Hf) и родственных гидроксидов» В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч. 1, с.29
28. И.Е. Анимица, Н. А. Тарасова, **Т. А. Денисова, Н. А. Журавлев**, В. Я. Кавун «Новые перспективные протонные проводники на основе браунмиллерита Ba₂In₂O₅» В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч.2, с. 11
29. А.А. Расковалов, **Т.А. Денисова**, О.Л. Андреев, **Н.А. Журавлев** «ЯМР и подвижность ионов лития в композитах на основе LiPO₃» В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч. 1, с.127.
30. М.Г. Зуев, А.М. Карпов, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**. «Золь-гель синтез кристаллофосфоров Sr₂Y_{8(1-x)}Eu_{8x}Si₆O₂₆» Тезисы докладов II Всероссийской школы молодых ученых по кинетике и механизму кристаллизации: Кристаллизация и материалы нового поколения. г. Иваново, 25-28 сентября 2012 г. С. 133.
31. Е.В. Поляков, **Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, **Я.В. Бакланова**, В.Т. Суриков « Кислотно-основные свойства оксигидратов Ti И Zr в ионообменных реакциях сорбции РЗМ», Сб. тезисов докладов на VII Российской конференции по радиохимии «Радиохимия 2012» г. Димитровград, с.79.
32. **И.И.Огородников, С.В.Ворох, М.В.Кузнецов**, А.Н.Титов, “Определение структуры поверхности 1T-TiSe₂ методом фотоэлектронной голографии.” // Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012 г. г. Екатеринбург, с. 136.
33. А.Н.Титов, С.Г.Титова, **М.В.Кузнецов**, Е.Г.Шкварина, А.А.Титов, Л.Н.Зеленина, Т.П.Чусова, М.Р.Шарафутдинов, А.И.Меренцов, Ю.М.Ярмошенко, А.С.Шкварин. “Дихалькогениды титана как нанореакторы.” // Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 183.
34. С.С.Туленин, А.Н.Ермаков, **М.В.Кузнецов**, Л.Н.Маскаева, В.Ф.Марков “Состав и структура тонких пленок системы Cu₂Se-In₂Se₃, полученных методом гидрохимического осаждения” //

- Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012 г. г. Екатеринбург, с. 186.
35. **A.S. Vorokh, I.I. Ogorodnikov, M.V. Kuznetsov** "Atomic Structure Of The 1T-TiSe₂ Surface Layers By Means Of STM, XPD and Photoelectron Holography" / Program schedule and abstract book 12th Int. Conf. Electronic Spectroscopy and structure., p. 249, 16-21 Sep. 2012, St.Malo, France.
 36. **I.I Ogorodnikov, A. S. Vorokh, M.V. Kuznetsov** "Photoelectron Holography Of A 1T-TiSe₂ Surface"/ Program schedule and abstract book 12th Int. Conf. Electronic Spectroscopy and structure., p. 228, 16-21 Sep. 2012, St.Malo, France.
 37. N.V. Gavrilov, A.S. Kamenetskikh, **M.V. Kuznetsov**, A.V. Chukin, E.V. Shishkina. "Investigation of TiC/a-C:H coatings deposited by magnetron sputtering of titanium in Ar-C₂H₂ gas mixture, ionized by electron beam." Abstract Book 3rd International Congress on Radiation Physics, High Current Electronics, and Modification of Materials, Tomsk, Russia, 17-21 September, 2012, Изд-во ТПУ, p. 433.
 38. Бушкова О.В., Андреев О.Л., Ярославцева Т.В., **Кузнецов М.В.**, Суриков В.Т., Антонов Б.Д., Малков В.Б., Kim J., Song J, Шпанченко Р.В. Механизмы деградации литий-ионных аккумуляторов с катодом на основе литий-марганцевой шпинели // «Фундаментальные проблемы преобразования энергии в литиевых электрохимических системах». Материалы XII Междунар. Конф. / Под ред. В.В. Галкина, В.П. Несмеева, А.М. Скундина. – Краснодар: Кубанский гос. ун-т, 2012. – С. 7-8.
 39. Н. А. Мухина, **А. С. Семенова, Д. Г. Келлерман**, Ю. Г. Чукалкин. Особенности магнитного упорядочения в LiMnPO₄, допированном ванадием. Материалы всероссийской научной конференции с международным участием «Байкальский материаловедческий форум» 9-13 июля 2012 г. Улан-Удэ, ч.2 стр.110
 40. **Д. Г. Келлерман, Е. В. Шалаева**, В. С. Горшков, Б. А.Царев. Влияние углеродного покрытия на свойства титан-литиевой шпинели Li₄Ti₅O₁₂. Материалы всероссийской научной конференции с международным участием «Байкальский материаловедческий форум» 9-13 июля 2012 г. Улан-Удэ, ч.2 стр.68
 41. (устный доклад) **А. С. Семенова, Д. Г. Келлерман, Е. В. Шалаева, Е. В. Заболоцкая**. Структура и свойства двойного литий-натриевого кобальтита – перспективного термоэлектрического материала Материалы всероссийской научной конференции с международным участием «Байкальский материаловедческий форум» 9-13 июля 2012 г. Улан-Удэ, ч.1 стр.43
 42. **А. С. Семенова, Д. Г. Келлерман, Заболоцкая Е.В. (устный доклад)** Особенности магнитных свойств кобальтита натрия Na_{0.75}CoO₂ и двойного кобальтита Li_{0.5}Na_{0.5}CoO₂. Тезисы докладов VI Всероссийской конференции молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием, с 121. С.-Пб. 2012.
 43. (Устный доклад) **Медведева Н.И.**, «Первопринципные исследования механических свойств сплавов» В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч. 1, с.129-130
 44. **Н.И. Медведева**, “Электронная структура, стабильность и деформационные свойства двойных и тройных силицидов молибдена” // Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012 г. г. Екатеринбург, с. 119.
 45. **Н.И. Медведева**, “Влияние кобальта на образование и свойства наноразмерных частиц меди в ОЦК Fe ” // Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012 г. г. Екатеринбург, с. 118.
 46. **Н.И. Медведева**, “Влияние 3d-примесей на образование наноразмерных частиц меди в феррите, XXI Уральская школа металловедов-термистов” «Актуальные проблемы фазовых и структурных превращений в сталях и сплавах», г. Магнитогорск, 23-27 февраля, 2012, с. 43.
 47. **Н.И. Медведева**, “Распределение примесей Mn, Al, Si, C в аустените и их влияние на энергии упаковки и сверхтонкие взаимодействия”, XXIII Международная конференция Мессбауэровская спектроскопия и ее применения” 6-10 октября 2012 года. г.Суздаль, с.56.
 48. (Устный доклад) **М.В.Кузнецов, И.И. Огородников, А.С.Ворох**, А.Н.Титов “СТМ-микроскопия, фотоэлектронная дифракция и голография поверхности кристалла 1T-TiSe₂.”

- Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012 г., г. Екатеринбург.
49. (Устный доклад) **М.В.Кузнецов**, “Фотоэлектронная спектроскопия, дифракция и голография как методы изучения поверхности твердых тел”. II Всероссийская Школа-семинар для молодых ученых и аспирантов, Терморентгенография и рентгенография наноматериалов ТРРН-2, Екатеринбург, 9-12 октября 2012 г.
 50. (Устный доклад) **М.В.Кузнецов**, “Электронная спектроскопия, дифракция и голография как методы изучения поверхности твердых тел”. Сборник тезисов XIII Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 7-12 ноября 2012 г.
 51. V.I. Simagina, A.M. Ozerova, O.V. Komova, O.V. Netskina, G.V.Odegova, **D. G. Kellerman**. Low temperature ferromagnetic cobalt boride nanocomposites as catalysts for hydrogen production. The twentieth annual international conference on composites or nano engineering ICCE-20 Beijing, China, July 22-28, 2012, P. 737.
 52. V.I. Simagina, O.V. Komova, A.M. Ozerova, O.V. Netskina, G.V. Odegova, **D. G. Kellerman**. Using of boron-containing hydrides for synthesis of low-temperature cobalt boride. International Workshop HEMs-2012 «High energy materials: Demilitarization, Antiterrorizm and Civil Applications». Biysk. Russia. 5-7 September 2012. p. 34-36
 53. **Ya.V. Baklanova**, A.V. Ishchenko, **T.A. Denisova**, L.G. Maksimova, B.V. Shulgin, V.V. Yagodin Thermoluminescence Properties Of Lithium Hafnate // Abstracts of 3rd International Congress on Radiation Physics and Chemistry of Condensed Matter, High Current Electronics and Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, Tomsk, 2012, P.113-114.
 54. **N.V. Tarakina**, A.P. Tyutyunnik, **Ya.V. Baklanova**, L.G. Maksimova, **T.A. Denisova**, R.B. Neder “Crystal structure of new $\text{HfO}(\text{OH})_2$ oxyhydroxide” // Abstracts of 13th European Powder Diffraction Conference EPDIC-13. Grenoble, 28-31 October, 2012. P.14.
 55. И.Ю. Арапова, С.В. Верховский, А.П. Геращенко, К.Н. Михалев, А.Ф. Садыков, **Я.В. Бакланова**, **Т.А. Денисова**, **И.Р. Шеин**. Локализация и подвижность Li в ионном проводнике Li_2ZrO_3 по данным ЯМР $^{6,7}\text{Li}$. // Сборник тезисов XIII Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества, Екатеринбург, 7-14 ноября 2012. С.139
 56. Д.Г. Келлерман, В.С. Горшков, **Е.В. Шалаева**, Б.А. Царев, Е.Г. Вовкотруб, “Микроструктура и эффекты упорядочения в катодных материалах”// XXIV Российская конференция по электронной микроскопии, 29 мая-1 июня 2012, Черноголовка, с.94.
 57. (Устный доклад) **Е.В. Шалаева**, Просвечивающая электронная микроскопия в исследовании фазовых превращений, упорядочения и разупорядочения в неорганических соединениях, сплавах и минералах // Материалы “IV Всероссийской молодежной научной конференции”, Екатеринбург, 15-18 октября 2012, С.65.
 58. (Устный доклад) **Е.В. Шалаева**, А.Ф. Прекул, Е.О. Смирнова, С.В. Смирнов, “Планарные дефекты икосаэдрической фазы в сплавах Al-Cu-Fe: структура, механизмы образования, механические свойства”// В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч. 1, с.167-168.
 59. А.А. Марков, **Е.В. Шалаева**, М.В. Патракеев, И.А. Леонидов, В.Л. Кожевников, “Наноразмерная гетерогенность в упорядочивающихся оксидах $\text{SrFe}_{1-x}\text{Ta}_x\text{O}_{3-\square}$ с функциональными ионно-транспортными свойствами”// В сб.: Байкальский материаловедческий форум, Материалы, Изд-во БНЦ СО РАН, Улан-Удэ, 2012, Ч. 2, с.105-106.
 60. **В.П.Жуков**, В. М. Зайнуллина. “Динамика электронных возбуждений и фотокаталитическая активность полупроводниковых оксидов” // В сб. "Химия твердого тела и функциональные материалы. Всероссийская конференция, тезисы докладов", Екатеринбург, 2012, с. 59
 61. В.М. Зайнуллина, **В.П.Жуков**. “Оптические и магнитные свойства анатаза, легированного бором, углеродом или азотом.” // В сб. "Химия твердого тела и функциональные материалы. Всероссийская конференция, тезисы докладов", Екатеринбург, 2012, с. 63
 62. (Устный доклад) **Рыжков М.В.**, Дэлли Б., “Электронное строение и стабильность наночастиц Fe_nO_m и фрагментов кристаллического оксида железа” Всероссийская конференция «Химия твердого тела и функциональные материалы», 6-10 февраля 2012г. г. Екатеринбург, с. 153.

63. К.И. Маслаков, **М.В. Рыжков**, А.Ю. Тетерин, Ю.А. Тетерин, К.Е. Иванов, В.Г. Петров, Д.А. Енина, С.Н. Калмыков, “Структура рентгеноэлектронных спектров и природа химической связи в NpO_2 “// Тезисы VII Российской конференции по радиохимии «Радиохимия – 2012» Димитровград, 15-19 октября, 2012, с.58.
64. К.И. Маслаков, **М.В. Рыжков**, А.Ю. Тетерин, Ю.А. Тетерин, К.Е. Иванов, В.Г. Петров, Д.А. Енина, С.Н. Калмыков, “Структура спектров РЭС валентных и внутренних электронов и природа химической связи в PuO_2 “// Тезисы VII Российской конференции по радиохимии «Радиохимия – 2012» Димитровград, 15-19 октября, 2012, с.59.
65. L.Vukcevic, Yu.A.Teterin, K.I. Maslakov, **M.V. Ryzhkov**, A.Yu. Teterin, V.G. Petrov, S.N. Kalmykov, “Degree of participation of filled Pu6p and O2s orbitals in the chemical bond in PuO_2 “// 10th International Seminar “Mathematical Models & Modeling in Laser-Plasma Processes & Advanced Science Technologies” Petrovac, Montenegro, may 26 – june 1, 2012, с.39.
66. J.G.Tobin, S.W.Yu, B.W.Chung, **M.V. Ryzhkov**, A.Mirmelstein, “Comparison of spectroscopic data with cluster calculations of plutonium, plutonium dioxide and uranium dioxide“// AVS International Symposium, Tampa, FL, October 28 – November 2, 2012, p.151.