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

ноябрь 2010- ноябрь 2011

МОНОГРАФИИ

ОБЗОРЫ

1. **Enyashin A.N.** “Theoretical Studies of Inorganic Fullerenes and Fullerene-Like Nanoparticles” // **Israel J. Chem.**, V. 50, P. 468-483 (2010).
2. Seifert G., **Enyashin A.N.**, Heine T. “Solid-State Structures of Small Fullerenes” // **Chapter 30 in book: “Handbook of Nanophysics, Vol. 2: Clusters and Fullerenes”**, Ed. K.D. Sattler (2011), Publisher CRC Press (Taylor & Francis Group), 6000 Broken Sound Parkway NW, Suite 300, Boca Raton, FL 33487-2742, ISBN: 978-1-4200-7554-0.
3. **Enyashin A.N.**, Seifert G. “Inorganic Fullerenes And Nanotubes” // **Chapter 12 in book: “Handbook of Nanophysics, Vol. 4: Nanotubes and Nanowires”**, Ed. K.D. Sattler (2011), Publisher CRC Press (Taylor & Francis Group), 6000 Broken Sound Parkway NW, Suite 300, Boca Raton, FL 33487-2742, ISBN: 978-1-4200-7542-7.
4. Seifert G., Baldoni M., Mercuri F., **Enyashin A.N.** “Theoretical Strategies for Functionalization and Encapsulation of Nanotubes” // **Chapter 4 in book: “Computational Nanoscience” (+ cover page of book)**, Ed. E. Bichoutskaia et al. (2011), Publisher Royal Society of Chemistry, ISBN: 9781849731331.
5. **Ивановский А.Л.** “Поиск новых сверхтвердых и несжимаемых материалов на основе высших боридов *s, p, d* металлов” // **Сверхтвердые материалы**, № 2, с. 3-21 (2011).
6. **Медведева Н.И., Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** “Моделирование электронного строения, химической связи и свойств тройного силикокарбида Ti_3SiC_2 ” // **Ж. структ. химии**, Т. 52, № 4, С. 795-811 (2011)
7. **Ivanovskii A.L.** “New ternary $ThCr_2Si_2$ -type iron-selenide superconducting materials: synthesis, properties and simulations” // **Physica C**, V. 471, No. 1-2, P. 409-427.
8. **Ivanovskii A.L.** “Mechanical and electronic properties of diborides of transition metals from first principles: toward search of novel ultra-incompressible and superhard materials” // **Progress Mater. Sci.**, V.51, No. 1, P. 184-228 (2012)
9. **Ивановская В.В., Ивановский А.Л.** “Атомно-модифицированные нанотрубки” // **Успехи химии**, Т. 80, № 8, С. 761-783 (2011).
- 10.

СТАТЬИ В ЗАРУБЕЖНЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Shein I.R., Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** “Nanotubes of layered iron-based superconductors: simulations of atomic structure and electronic properties” // **Comput. Mater. Sci.**, V. 50, No.3, P. 824-827 (2011).
2. **Shein I.R., Suetin D.V., Ivanovskii A.L.** “Electronic band structure and Fermi surface of new low-temperature Ni-based superconductors: 3.3K $(Ni_2P_2)(Sr_4Sc_2O_6)$ and 2.7K $(Ni_2As_2)(Sr_4Sc_2O_6)$ from first principles” // **Physica B**, V. 406, Iss. 3, p. 676-682 (2011).
3. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Elastic properties of superconducting MAX phases” // **phys. status solidi (b)** V. 248, No. 1, p. 228–232 (2011).
4. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Electronic structure and Fermi surface of new K intercalated iron selenide superconductor $K_xFe_2Se_2$ ” // **Phys. Lett. A**. V. 375, No 6, pp. 1028-1031 (2011).
5. **Denisova T.A., Maksimova L.G., Kellerman D.G., Zabolotskaya E.V., Melkozerova M.A., Mitrofanov V.Ya., Dorogina G.A.** “Magnetic Properties of Intercalated Zinc Hexacyanoferrate (II)” // **Solid State Phenomena** Vol. 168-169 (2011) pp 169-172
6. **Shalaeva E.V., Prekul A.F.** “Structural state of β -solid solution in rapidly quenched alloys of

- Al₅₀Cu_{50-x}Fe_x (x = 17, 13, 6) and ordered η₁-AlCu phase formation” // **Phil. Mag.** V.91, N.4, p.589-608 (2011).
7. Buzlukov, A. Trokiner, I. Leonidov, S. Verkhovskii, A. Yakubovsky, A. Gerashenko, A. Stepanov, **I. Baklanova**, V. Kozhevnikov, A. Tankeyev. “Ordering of vacancies and oxygen hopping probed by ⁷¹Ga, ²⁵Mg and ¹⁷O NMR in La_{1-x}Sr_xGa_{1-x}Mg_xO_{3-x} (x ≤ 0.2) ceramics” // **J. Solid State Chem.** 184 (2011) 36–43.
 8. **Ivanovskaya V.V.**, Zobelli A., Teillet-Billy D., Rougeau, N., Sidis V., Briddon, P.R. “Enhanced H₂ catalytic formation on specific topological defects in interstellar graphenic dust grain models” // **Phys. Rev. B.** V. 82 Iss. 24, art. 245407 (2010).
 9. **Enyashin A.N.**, Seifert G. “Molecular dynamics simulations of capillary imbibition of KI melt into MoS₂ nanotubes” // **Chem. Phys. Lett.**, V. 501, P. 98-102 (2010).
 10. Rasche B., Seifert G., **Enyashin A.N.** “Stability and Electronic Properties of Bismuth Nanotubes” // **J. Phys. Chem. B**, V. 114, P. 22092-22097 (2010).
 11. Abu-Yaron A., Levy M., Tenne R., Popovitz-Biro R., Weidenbach M., Bar-Sadan M., Houben L., **Enyashin A.N.**, Seifert G., Feuermann D., Katz E.A., Gordon J.M. “MoS₂ hybrid nanostructures: from octahedral to quasi-spherical shells within individual nanoparticles” // **Angew. Chem. Inter. Ed.**, V. 50, № 8, P. 1810-1814 (+cover page) (2011).
 12. Cohen E., Goldbart O., Schreiber R., Barlam D., Lorenz T., **Enyashin A.N.**, Seifert G., Cohen S.R. “Radial Compression Studies of WS₂ Nanotubes” // **J. Vac. Sci. Technol. B**, V. 29, № 2, P. 021009 (2011).
 13. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** “Graphene allotropes” // **phys. status solidi B**, V. 248, No. 8, P. 1879-1883 (2011).
 14. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Electronic band structure, Fermi surface, and elastic properties of polymorphs of the new 5.2K iron-free superconductor SrPt₂As₂ from first principles calculations” // **Phys. Rev. B**, V. 83, Iss 10, art 104501 (9 pp) (2011).
 15. **Zhukov V.P.**, Zainulina V.M., Chulkov E.V. “*Ab initio* approach to structural, electronic and optical properties of B-, C- and N-doped anatase”// **Intern. J. Modern Phys. B**, V. 24, No. 3, pp. 6064-6067 (2010).
 16. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Elastic properties and inter-atomic bonding in new superconductor KFe₂Se₂ from first principles calculations” // **Solid State Commun.** V. 151, No 9, p. 671-673 (2011).
 17. **Suetin D.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Structural, electronic properties and inter-atomic bonding in layered iron pnictide oxides (Fe₂As₂)(Sr₄M₂O₆), where M are Mg and Ti” // **Phys. Letters A**, V. 375, No. 20, P. 2075-2078 (2011).
 18. **Suetin D.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Structural, electronic, and magnetic properties of layered cobalt pnictide oxides (Co₂As₂)(Sr₄Sc₂O₆) and (Co₂P₂)(Sr₄Sc₂O₆) from first principles”// **Solid State Sci.**, V.13, No.5, P. 837-842 (2010)
 19. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Electronic band structure and Fermi surface of new 3.7K superconductor LiCu₂P₂ from first principles calculations” // **Physica C**, V. 471, No. 7-8, pp. 226-228 (2011).
 20. **Bannikov V.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Elastic and electronic properties of hexagonal rhenium sub-nitrides Re₃N and Re₂N in comparison with *hcp*-Re and wurtzite-like rhenium mononitride ReN” // **phys. status solidi B**, V. 248, No 6, pp. 1369-1374 (2011)
 21. **Bannikov V.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Electronic band structure and inter-atomic bonding in layered 1111-like Th-based pnictide oxides ThCuPO, ThCuAsO, ThAgPO, and ThAgAsO from first principles calculations” // **Comput. Mater. Sci.**, V.50, No. 9, pp. 2736-2740 (2011)
 22. B. Verberck, **N.V. Tarakina**. “Tubular fullerenes inside carbon nanotubes: optimal molecular orientation versus tube radius” // **European Physical Journal B** V. 80, P. 355–362 (2011).
 23. **Enyashin A.N., Ivanovskii A.L.** “Graphene-like BN allotropes: structural and electronic properties from DFTB calculations” // **Chem. Phys. Lett.**, V. 509, No.4-6, P.143-147 (2011)
 24. A.P. Tyutyunnik, G.V. Bazuev, **M.V. Kuznetsov**, Yu.G. Zainulin. Crystal structure and magnetic properties of double perovskite Mn₂FeSbO₆. // **Materials Research Bulletin.** 46 (2011) 1247–1251.
 25. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** “3D полиморфы нитрида бора: SCC-DFTB моделирование стабильности, структурных, упругих и электронных свойств” // **Теор. экспер. химия**, Т. 47, №

- 3, C. 148-151 (2011).
26. **Bannikov V.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Magnetic and electronic properties of nitrogen-doped lanthanum sesquioxide La_2O_3 as predicted from first principles” // **J. Supercond. Novel Magnet.** V. 24, No. 5, P. 1693-1696 (2011)
 27. M. Yang, H. Baik, **V. Ivanovskaya**, C. Colliex, A. Benayad. “O K-energy loss near-edge structure change induced by tantalum impurity in monoclinic hafnium oxide” // **J. Appl. Phys.** V. 109, No. 5, art. 053723 (2011).
 28. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Structural, elastic, electronic and magnetic properties of ThCr_2Si_2 from first-principles calculations” // **Solid State Commun.**, V. 151, No. 17, P.1165-1168 (2011).
 29. M.A. Melkozerova, N.V. Tarakina, L.G. Maksimova, A.P. Tyutyunnik, L.L. Surat, I.I. Leonidov, V.G. Zubkov, **E.V. Zabolotskaya**, R.F. Samigullina. “Application of a modified Pechini method for the synthesis of $\text{Ln}_2\text{MGe}_4\text{O}_{12}$ (Ln = Y, Eu; M = Ca, Zn, Mn) optical hosts” // **J. Sol-Gel Sci. Technol.** (2011) DOI: 10.1007/s10971-011-2508-6.
 30. **Shein I.R., Bannikov V.V., Ivanovskii A.L.** “Elastic properties and inter-atomic bonding in layered Fe-Cu oxide arsenide $\text{Sr}_2\text{Fe}_2\text{CuAs}_2\text{O}_2$ ” // **phys. status solidi (b)**, V. 248, No. 9, P. 2165-2169 (2011)
 31. **Viktoriya V. Ivanovskaya**, Alberto Zobelli, Philipp Wagner, Malcolm I. Heggie, Patrick R. Briddon, Mark J. Rayson, Chris P. Ewels. “Low-Energy Termination of Graphene Edges via the Formation of Narrow Nanotubes” // **Phys. Rev. Lett.**, V. 107, No 6, art. 065502 (2011)
 32. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Electronic bands, Fermi surface, and elastic properties of new 4.2K superconductor SrPtAs with a honeycomb structure from first-principles calculations” // **Physica C**, V.471, No. 1-2, P. 594-596 (2011).
 33. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Перелева**, О.И. Гырдасова. “Стабильность анатазной фазы в наноразмерном диоксиде титана, допированном европием (III), самарием (III) и железом (III).” // **Теор. эксперим. химия**, Т. 47, № 4, С. 208-211 (2011).
 34. **Shein I.R.** “Stability, structural, elastic, and electronic properties of polymorphs of the superconducting disilicide YIr_2Si_2 ” // **Physica B**, V.406, P. 3525 -3530 (2011).
 35. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Structural, electronic properties and Fermi surface of ThCr_2Si_2 -type tetragonal KFe_2S_2 , KFe_2Se_2 , and KFe_2Te_2 phases as parent systems of new ternary iron-chalcogenide superconductors” // **J. Supercond. Novel Magnet.** V.24, No. 8, P.2215-2221 (2011).
 36. **N.I. Medvedeva**, D. Van Aken, J. E. Medvedeva, “Effect of carbon distribution on manganese magnetic moment in bcc Fe-Mn alloy” // **J. Phys.: Condens. Matter** V. 23, art. 326003 (2011).
 37. **D.G. Kellerman**, **E.V. Shalayeva**, V.S. Gorshkov, B.A. Tsaryev, E.G. Vovkotrub “Structure peculiarities of carbon-coated lithium titanate: Raman spectroscopy and electron microscopic study” // **Solid State Sciences**, V. 13, doi:10.1016/j.solidstatesciences.2011.10.018 (2011)
 38. **Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Structural, electronic properties and Fermi surface of ThCr_2Si_2 -type charge-balanced KFe_2AsSe phase as a parent system for the group of mixed pnictide-chalcogenide superconductors” // **Phys. Rev. B**. 84, Iss. 18, art. 184509 (2011)
 39. **Шейн И.Р., Ивановский А.Л.** “*Ab initio* исследование природы химической связи и электронной структуры слоистой фазы $\text{Ca}_{10}(\text{Pt}_4\text{As}_8)(\text{Fe}_2\text{As}_2)_5$ как базисной системы для поиска новых Fe-содержащих сверхпроводников” // **Теор. эксперим. химия**, Т. 47, № 5, С. 279-282 (2011).
 40. **N.V. Tarakina**, R.B. Neder, L.G. Maksimova, **I.R. Shein, Y.V. Baklanova, T.A. Denisova** “Defect crystal structure of $\text{TiO}(\text{OH})_2$ and related lithium salt Li_2TiO_3 ” // **Z. Kristallogr. Proc.** 1 (2011) 431-436
 41. **Bannikov V.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “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)
 42. **Suetin D.V., Shein I.R., Ivanovskii A.L.** “Structural, electronic and magnetic properties of tungsten oxycarbides $\text{WC}_{1-x}\text{O}_x$ and $\text{WO}_{3-x}\text{C}_x$ from first principles calculations” // **phys. status solidi**, B V. 248, No. 12, P. 2884–2892 (2011).
 43. A.P. Tyutyunnik, G.V. Bazuev, **M.V. Kuznetsov**, Yu.G. Zainulin. Crystal structure and magnetic properties of double perovskite $\text{Mn}_2\text{FeSbO}_6$. // **Materials Research Bulletin**. 46 (2011) 1247–1251.
 44. 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)
45. 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*, DOI: 10.1021/jp2085846
46. Polyakov E.V., Volkov I.V., Surikov V.T., **Perelyaeva L.A.** Solubility of monazite chemical components in humic acid solutions // **J. Radioanalytical and Nuclear Chemistry**. 2010. V. 286. №3. P. 707-711.
47. **A.S. Semenova, D.G. Kellerman, E.V. Shalaeva**, R.F. Samigullina, and N. I. Kourov, **Hindawi Publishing Corporation International Journal of Inorganic Chemistry** Volume 2011, Article ID 649183, doi:10.1155/2011/649183

СТАТЬИ В ОТЕЧЕСТВЕННЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** “Нанотубулярные композиты: моделирование капиллярного заполнения нанотрубок дисульфида молибдена молекулами $TiCl_4$ ” // **Наносистемы: физика, химия, математика**. Т.1, № 1, с. 63-71 (2010).
2. Андриенко О. С., Егоров Н. Б., Жерин И. И., Полещук О. Х., **Ивановский А. Л.** “Квантово-химические расчеты характеристик сульфида свинца”. // **Известия Вузов. Серия Физика**, №11/2, С. 96-100 (2010).
3. **Семенова А.С.**, Мелкозерова М.А., **Заболоцкая Е.В., Келлерман Д.Г.**, Косова Н.В., Девяткина Е.Т. “Определение зарядового состояния ионов переходных металлов, входящих в $Li_{1+x}Ni_{1/3}Co_{1/3}Mn_{1/3}O_2$ магнитными методами” // **Электрохимическая энергетика**, 2010, т.10, №3, 122-127
4. Месилов В.В., Галахов В.Р., **Семенова А.С., Келлерман Д.Г.**, Елохина Л.В. “Рентгеновские спектры и особенности строения литий-натриевого кобальтита $Li_xNa_yCoO_2$ ” // **Физика твердого тела**, 2011, т. 53, № 2, 254-259
5. Мелкозерова М.А., **Заболоцкая Е.В., Семенова А.С., Келлерман Д.Г.**, Медведев Е.Ю., Базуев Г.В.” Магнитные свойства сложных оксидов $Ba_6Ni_{5-x}Mn_xO_{15}$ ($x=2, 3, 4$)” // **Физика твердого тела**, 2011, т. 53, № 2, 302-307
6. Чукалкин Ю.Г., Теплых А.Е., Пирогов А.Н., **Келлерман Д.Г.** “Магнетизм манганита $LiMn_2O_4$ в структурно упорядоченном и разупорядоченном состояниях” // **Физика твердого тела**, 2010, т. 52, № 12, 2382-2388
7. В.Б.Выходец, Т.Е.Куренных, А.Г.Кесарев, **М.В.Кузнецов**, В.В.Кондратьев, К.Хулсен, У.Кестер, “Диффузия нерастворимого углерода в оксидах циркония”. // **Письма в ЖЭТФ**, 2011, Т.93, №.1, С.8-12.
8. А.Н.Титов, **М.В.Кузнецов, А.С.Разинкин**, “К вопросу о природе состояния с волной зарядовой плотности в $TiSe_2$ по данным сканирующей туннельной микроскопии”. // **Физика твердого тела**, 2011, Т.53, №.5, С. 1009-1013 (2011).
9. Г.С.Захарова, Н.В.Подвальная, **М.В.Кузнецов**, “РФЭС исследование наностержней допированного оксида ванадия $M_xV_2O_5 \cdot nH_2O$ ($M=Na, K, Rb, Cs$)” // **Ж. неорганической химии**, 2011, Т.56, №2, С.1-6.
10. В.Н. Красильников, А.П. Тютюнник, В.Г. Зубков, И.Ф. Бергер, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. “Условия образования, кристаллическая структура и физико-химические свойства $K_3VO_2(SO_4)_2$ ” // **Ж. неорганической химии**, Т. 56, № 1, 2011, с. 20-28.
11. В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. “Синтез, структура и свойства $M[VO_2(XO_4)(H_2O)_2] \cdot nH_2O$ ($X=S, M=K, Rb, NH_4, Tl; X=Se, M=K, Rb, NH_4$)” // **Ж. неорганической химии**, Т. 56, № 3, 2011, с. 367-372.
12. В.Н. Красильников, А.П. Тютюнник, В.Г. Зубков, И.Ф. Бергер, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. “Синтез, кристаллическая структура и колебательные спектры $M_4V_2O_3(SO_4)_4$ ($M = K, Rb, Cs$)” // **Ж. неорганической химии**, Т. 56, № 4, 2011, с. 531-540.

13. А.П. Тютюнник, В.Г. Зубков, В.Н. Красильников, И.Ф. Бергер, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**, М.Ю. Скрипкин, G. Svensson. “Кристаллическая структура и колебательные спектры $M[\text{VO}_2(\text{SeO}_4)(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ($M = \text{K}, \text{Rb}, \text{NH}_4$)” // **Ж. структурной химии**, Т.52, №2, 2011, с. 358-364.
14. В.Н. Красильников, А.П. Шгин, О.И. Гырдасова, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**, В.Г. Бамбуров. “Гликолят $\text{Ti}_{1-x}\text{Ln}_x(\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O})_{2-x/2}$ как эффективный прекурсор для получения диоксида титана, допированного лантаноидами $\text{Ti}_{1-x}\text{Ln}_x\text{O}_{2-x/2}$ ” // **Доклады АН, сер. химия**. Т. 437, № 5, 2011, с. 647-650.
15. Ю. В. Блинова, В. Р. Галахов, **М. В. Кузнецов**, С. В. Сударева, А. С. Семенова, А. С. Шкварин. Зарядовое состояние ионов меди в монокристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.8}$ (1.5 ат. % Се): рентгеновские фотоэлектронные и абсорбционные исследования. // **ФММ**, 2011, том 111, № 4, с. 376–382.
16. Л. К. Неудачина, А. Я. Голуб, Ю. Г. Ятлук, В. А. Осипова, Ю. А. Бердюгин, Е. М. Горбунова, Л. В. Адамова, О. В. Корякова, **М. В. Кузнецов**. “Сорбционные материалы на основе модифицированных полисилоксанов” // **Неорганические материалы**, 2011, том 47, № 4, с. 492–498.
17. А.П. Тютюнник, В.Н. Красильников, И.Ф. Бергер, В.Г. Зубков, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**. “Синтез, структура и физико-химические свойства $\text{K}[\text{VO}_2(\text{SeO}_4)(\text{H}_2\text{O})]$ и $\text{K}[\text{VO}_2(\text{SeO}_4)(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ” // **Ж. неорган. химии**, Т. 56, № 8, 2011, с. 1238–1247.
18. **Еняшин А.Н., Ивановский А.Л.** “Структурные, упругие и электронные свойства икосаэдрических субкарбидов (B_{12}C_3 , B_{13}C_2), субнитрида (B_{12}N_2) и субоксида бора (B_{12}O_2) по данным SCC-DFTB расчетов” // **Физика твердого тела**, Т.53, № 8, с. 1493-1497 (2011).
19. **Д.В. Суетин, И.Р. Шеин**, В.Г. Бамбуров., **Ивановский А.Л.** “Структурно-индуцированный переход полупроводник - металл в моносульфиде свинца PbS : *ab initio* расчеты” // **Доклады АН, сер. физ. химия**. Т. 437, № 1, с. 50-53 (2011).
20. **И.Р. Шеин**, В.Г. Бамбуров., **Ивановский А.Л.** “Намагничивание циркона в присутствии примесей 3d металлов: *ab initio* расчеты” // **Доклады АН, сер. физ. химия**. Т. 438, № 1, с. 66-69 (2011).
21. **А.Н.Еняшин**, В.Г. Бамбуров., **Ивановский А.Л.** “Состав, стабильность и модули упругости высших аллотропов бора (в-В и tII-В) по данным SCC-DFTB расчетов” // **Доклады АН, сер. физ. химия**, Т. 438, № 6, с. 773-776 (2011)
22. Полещук О.Х., Егоров Н.Б., Жерин И.И., **Ивановский А.Л.** “Использование функционала плотности для оценки изотопных сдвигов в соединениях свинца” // **Бутлеровские сообщения**, Т.24, №1, С.69-75 (2011).
23. **М. В. Кузнецов**, А. Я. Запечалов, Л. В. Золотухина, И. Г. Арефьев, Б. Р. Гельчинский, “Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия поверхности ультрадисперсных порошков сплава меди после обработки фторированными полиэфирами.” // **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования**. № 5, С.43 (2011).
24. Золотухина Л.В., **Кузнецов М.В.**, Гельчинский Б.Р., Жидовинова С.В., Арефьев И.Г. “Исследование поверхности частиц ультрадисперсных медных порошков, полученных способом газофазной конденсации.” // **Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия**. №1, С. (2011).
25. **В.В. Банников, И.Р. Шеин, А.Л. Ивановский**. “Механические свойства и электронное строение циркона по данным первопринципных FLAPW-GGA расчеты” // **Материаловедение**, № 7, с. 2-5 (2011)
26. Зайнуллина В.М., **Жуков В.П.**, Коротин М.А., Поляков Е.В. Влияние легирования атомами бора, углерода и азота на магнитные и фотокаталитические свойства анатаза. // **Физика твердого тела**. 2011. Т. 53. вып.7. С.1284-1291.
27. Хлебников Н.А., Поляков Е.В., Борисов С.В., Шепатковский О.А., Григоров И.Г., **Кузнецов М.В.**, Швейкин Г.П., Смирнов С.В., Матафонов П.П., Трапезников А.В., Чеботина М.Я., Гусева В.П. “Возможности применения композитных трековых мембран с нитридным покрытием для фракционирования микроэлементов в природной воде”. // **Радиохимия**. 2011. Т. 53. Вып. 1. С. 91-95.

28. **Д.Г. Келлерман, Н.А. Журавлев, А.С. Семенова, И.Р. Шейн, М.В. Кузнецов.** “ЯМР ^{23}Na в двойном литий-натриевом кобальтите” // **Известия РАН. Серия физическая.** 2011. Т. 75, №8. С. 1219-221.
29. **Я.В. Бакланова, Т.А. Денисова,** Л.Г. Максимова **Н.А. Журавлев.** “Высокодисперсные фазы оксигидроксидов состава $\text{MO}(\text{OH})_2$ ($M = \text{Zr}, \text{Hf}$)” // **Известия РАН. Серия физическая.** 2011, № 8 (75), с. 1180–1182.
30. **Шейн И.Р. Денисова Т.А., Бакланова Я.В., Ивановский А.Л.** “Структурные, электронные свойства и химическая связь в протонированных металлатах лития $\text{Li}_{2-x}\text{H}_x\text{MO}_3$ ($M = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Sn}$)” // **Ж. структ. химии,** Т. 52, № 6, С. 1081-1089 (2011).
31. **М. В. Кузнецов,** О. Д. Линников, И. В. Родина. “РФЭ-спектры поверхности нанопорошков магнетита после сорбции хрома (VI) из водных растворов” // **Неорганические материалы,** 2012, Том 48, № 2, С. 1–7.
32. Егоров Н.Б., Полещук О.Х., Жерин И.И., **Ивановский А.Л.** «Квантово-химическое исследование структуры и свойств изотопночистых селенидов и теллуридов свинца» // **Бутлеровские сообщения,** Т.28, №20, С.1-6 (2011).
33. Марков В.Ф., Туленин С.С., Маскаева Л.Н., **Кузнецов М.В.** Термодинамический анализ условий образования и химическое осаждение твердых растворов замещения в системе $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{In}_2\text{Se}_3$. // **Бутлеровские сообщения,** Т.26, №12, С.29-36 (2011).
34. Г. С. Захарова, **М. В. Кузнецов,** Синтез и свойства микростержней $(\text{VO})_{0.09}\text{V}_{0.18}\text{Mo}_{0.82}\text{O}_3 \cdot 0.54\text{H}_2\text{O}$. // **ЖНХ,** 2011, том 56, № 12, с. 1–6.
35. Тетерин А.Ю. **Рыжков М.В.,** Тетерин Ю.А., Маслаков К.И., Райх Т., Молодцов С.Л. “Резонансная эмиссия валентных электронов UO_2 , U_3O_8 и UO_{2+x} при возбуждении вблизи $\text{O}_{4,5}$ (U) порога поглощения. // **Ж. структ. химии,** Т. 52, № 2, С. 295-303 (2011).

ПАТЕНТЫ

1. **Денисова Т.А., Бакланова Я.В.,** Максимова Л.Г. Патент № 2431603 от 20.10.2011 “Способ получения метатитановой кислоты и сорбент для извлечения актинидных элементов”
2. **Денисова Т.А., Бакланова Я.В.,** Максимова Л.Г. Положительное решение от 27.09.2011 по заявке № 2010110517/05, “Способ получения порошка цирконата лития” (приоритет от 19.03.2010).

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

1. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Magnetic and electronic properties of nitrogen-doped lanthanum sesquioxide La_2O_3 as predicted from first principles” // **cond-mat.arXiv** : cond-mat.arXiv : 1012.1108 (2010)
2. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii.** “Graphene allotropes: stability, structural and electronic properties from DF-TB calculations” // **cond-mat.arXiv** : cond-mat.arXiv : 1012.1424 (2010)
3. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic structure and Fermi surface of new K intercalated iron selenide superconductor $\text{K}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$ ” // **cond-mat.arXiv** : 1012.5164 (2010)
4. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic band structure, Fermi surface, and elastic properties of polymorphs of the new 5.2K iron-free superconductor SrPt_2As_2 from first principles calculations” // **cond-mat.arXiv**: 1101.5253 (2011).
5. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Elastic properties and inter-atomic bonding in new superconductor KFe_2Se_2 from first principles calculations” // **cond-mat.arXiv**: 1102.3248 (2011).
6. **A.L. Ivanovskii.** “New ternary ThCr_2Si_2 -type iron-selenide superconducting materials: synthesis, properties and simulations” // **cond-mat.arXiv**: 1104.3400 (2011)
7. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic band structure and inter-atomic bonding in layered 1111-like Th-based pnictide oxides ThCuPO , ThCuAsO , ThAgPO , and ThAgAsO from first principles calculations” // **cond-mat.arXiv**: 1104.3434 (2011)

8. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic band structure, Fermi surface, and elastic properties of new 4.2K superconductor SrPtAs from first-principles calculations” // **cond-mat.arXiv:** 1105.2379 (2011).
9. **И.И. Огородников, М.В. Кузнецов, А.С. Разинкин.** Моделирование рентгеновской фотоэлектронной дифракции на поверхности $1T\text{-TiSe}_2$. // **Проблемы спектроскопии и спектрометрии:** межвуз. сб. науч. тр. Екатеринбург: УрФУ им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Вып. 28. С. 24-36 (2011).
10. **И.В. Бакланова, В.Н. Красильников, Л.А. Переляева, О.И. Гырдасова, О.А. Кайгородова, А.С. Шелюг, В.К. Слепухин.** Синтез, морфология и спектральные характеристики нанодисперсного сесквиоксида скандия, допированного европием. // **Проблемы спектроскопии и спектрометрии:** межвуз. сб. науч. тр. Екатеринбург: УрФУ им. Первого Президента России Б.Н. Ельцина, Вып. 28. С. 122-129 (2011).
11. **V.V. Ivanovskaya, Alberto Zobelli, Philipp Wagner, Malcolm I. Heggie, Patrick R. Briddon, Mark J. Rayson, Chris P. Ewels** “Low energy graphene edge termination via small diameter nanotube formation” // **cond-mat.arXiv:** 1107.0751 (2011).
12. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural, electronic properties and Fermi surface of ThCr_2Si_2 -type charge-balanced KFe_2AsSe phase as a parent system for a new group of “mixed” pnictide-chalcogenide superconductors” // **cond-mat.arXiv:** 1107.2479 (2011)
13. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** Electronic structure and chemical bonding in novel tetragonal phase $\text{Ca}_{10}(\text{Pt}_4\text{As}_8)(\text{Fe}_2\text{As}_2)_5$ as a parent material for the new family of high- T_C iron-pnictide superconductors” // **cond-mat.arXiv:** 1100.0495 (2011)
14. **И.В. Бакланова, В.Н. Красильников, Л.А. Переляева, О.И. Гырдасова.** “Определение методом спектроскопии комбинационного рассеяния устойчивости анатазной фазы в наноразмерном диоксиде титана, допированным европием (III), самарием (III) и железом (III)”. Сборник трудов 14-го Международного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, ODPO-14, Часть 1, 14-19 сентября 2011 г., Ростов-на-Дону, п. Лоо, с. 49-52.
15. **И.В. Бакланова, В.Н. Красильников, Л.А. Переляева, О.И. Гырдасова, О.А. Кайгородова.** “Синтез, морфология и спектральные характеристики нанодисперсного сесквиоксида скандия, допированного европием”. Сборник трудов 14-го Международного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, ODPO-14, Часть 1, 14-19 сентября 2011 г., Ростов-на-Дону, п. Лоо, с. 53-56.
16. **И.В. Бакланова, В.Н. Красильников, Л.А. Переляева, Э.Г. Вовкотруб.** “Синтез, микроструктура и оптические свойства ацетата скандия, допированного европием”. Сборник трудов 14-го Международного симпозиума “Упрочнение в минералах и сплавах”, ОМА-14, Часть 1, 8-13 сентября 2011 г., Ростов-на-Дону, п. Лоо, с. 41-43.
17. **Т.И. Красенко, Н.А. Журавлев, Л.А. Переляева.** “Исследование особенностей локальной структуры $\text{Zn}_{2-2x}\text{Cd}_{2x}\text{V}_2\text{O}_7$ методами ЯМР и ИК спектроскопии”. Сборник трудов 14-го Международного симпозиума “Упрочнение в минералах и сплавах”, ОМА-14, Часть I, 8-13 сентября 2011 г., Ростов-на-Дону, п. Лоо, с. 118-122.
18. **Я.В. Бакланова, Н.В. Таракина, Л.Г. Максимова, Т.А. Денисова, Н.А. Журавлев** “Зависимость реакционной способности титаната лития от дефектности кристаллической структуры”. Сборник трудов 14-го Международного симпозиума “Упрочнение в минералах и сплавах”, ОМА-14, Часть I, 8-13 сентября 2011 г., Ростов-на-Дону, п. Лоо, с. 123-124.
19. **Н.А. Мухина, Д.Г. Келлерман, Ю.Г. Чукалкин, Н.А. Журавлев** “Синтез и исследование магнитных свойств литий-марганцевого фосфата”. Сборник трудов 14-го Международного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, ODPO -14, Часть II, 14-19 сентября 2011 г., Ростов-на-Дону, п. Лоо, с. 44-47.
20. **А.С. Разинкин, И.И.Огородников, А.Н. Титов, М.В. Кузнецов,** Структурные дефекты на поверхности $1T\text{-TiSe}_2$: эксперимент и модельные расчеты фотоэлектронной дифракции. // В сб.: Упорядочение в минералах и сплавах, 14-й международный симпозиум, г. Ростов-на-Дону – п. Лоо, 8-13 сентября 2011, с. 80-86.
21. **И.И.Огородников, М.В.Кузнецов, А.С.Разинкин.** Моделирование рентгеновской фотоэлектронной дифракции на поверхности $1T\text{-TiSe}_2$. // Проблемы спектроскопии и спектрометрии: межвуз. сб. науч. тр. Екатеринбург: УрФУ им. Первого Президента России Б.Н.

- Ельцина, 2011. Вып. 28. С. 24-36.
22. Г.С.Захарова, **М.В.Кузнецов**. Синтез и свойства микростержней $(VO)_{0.09}V_{0.18}Mo_{0.82}O_3 \cdot 0.54H_2O$. // В сб.: Порядок, беспорядок и свойства оксидов, 14-й международный симпозиум, г. Ростов-на-Дону – п. Лоо, 14-19 сентября 2011, с. 208-209.
 23. **Andrey N. Enyashin**, Lena Yadgarov, Lothar Houben, Igor Popov, Marc Weidenbach, Reshef Tenne, Maya Bar-Sadan, Gotthard Seifert “New route for stabilization of 1T-WS₂ and MoS₂ phases” // **cond-mat.arXiv**: 1110.3848 (2011).
 24. А. В. Ищенко, **Я.В. Бакланова, Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, О.А. Кайгородова, О.С. Тесленко, Б.В. Шульгин “Радиационно-стимулированные эффекты в гафнате лития Li₂HfO₃” // Межвузовский сборник научных трудов “**Проблемы спектроскопии и спектрометрии**” г. Екатеринбург. УрФУ. 2011. Вып. 28, с. 167-177.
 25. А. В. Ищенко, **Я.В. Бакланова, Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, В.А. Пустоваров, Б.В. Шульгин “ВУФ-спектроскопия гафната лития Li₂HfO₃” // Межвузовский сборник научных трудов “**Проблемы спектроскопии и спектрометрии**” г. Екатеринбург. УрФУ. 2011. Вып. 28, с. 184-186.
 26. **Я.В. Бакланова**, Н.В. Таракина, Л.Г. Максимова, **Т.А. Денисова, Н.А. Журавлев** “Зависимость реакционной способности титаната лития от дефектности кристаллической структуры” //Сборник трудов XIV международного симпозиума “**Фазовые превращения в твердых растворах и расплавах**” (ОМА-2011), 8-16 сентября 2011г., с. 123-124.
 27. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “*Ab initio* probing of the electronic band structure and Fermi surface of fluorine-doped WO₃ as a novel low-T_C superconductor» // **cond-mat.arXiv**: 1111.4305 (2011)
 28. **Н.И. Медведева, Ивановский А.Л.** “Распределение примесей в аустените и их влияние на энергии упаковки” Международный Симпозиум «Среды со структурным и магнитным упорядочением» Multiferroic 2011, Ростов-на-Дону, 4-8 сентября 2011 г., Труды симпозиума. Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, стр. 95-100.
 29. **Н.И. Медведева**, “Влияние примесных атомов на параметры решетки и стабильность Mo₅Si₃. Механизм хрупкости Mo₅Si₃ //Сборник трудов XIV международного симпозиума “**Упорядочение в минералах и сплавах**” (ОМА-2011), 8-13 сентября 2011г., Ростов-на-Дону, с. 29-30.
 30. **М.В.Рыжков, Н.И. Медведева**, Б. Дэлли “Влияние примесей марганца на магнитные свойства железо-углеродных и железо-оксидных наночастиц Fe_nC_m и Fe_nO_m” Международный Симпозиум «Среды со структурным и магнитным упорядочением» Multiferroic 2011, Ростов-на-Дону, 4-8 сентября 2011 г., Труды симпозиума. Ростов н/Д: ИПО ПИ ЮФУ, стр. 157-158.
 31. **М.В. Рыжков, А.Л. Ивановский**. Б. Дэлли “Связывание атомов тория, урана и плутония на наноразмерных фрагментах решеток кварца и крестобалита. Квантово-химические модели”//Сборник трудов XIV международного симпозиума “**Упорядочение в минералах и сплавах**” (ОМА-2011), 8-13 сентября 2011г., Ростов-на-Дону, с. 95.

ТЕЗИСЫ

1. К.В. Нефедова, В.Д. Журавлев, **Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**, О.В. Сивцова. “ПВС-и глицин-нитратный синтез оксидов железа, никеля, кобальта”. Тезисы **I Всероссийской конференции “Золь-гель синтез и исследование неорганических соединений, гибридных функциональных материалов и дисперсных систем “Золь-гель-2010”**”, 22-24 ноября, г. Санкт-Петербург, с. 122.
2. **A.S. Razinkin, A. N. Enyashin, I. I. Ogorodnikov, M. V. Kuznetsov**, A. N. Titov. Atomic defects on the surface of two-dimensional layered titanium dichalcogenides: STM-, XPD- experiment and quantum chemical simulation.// **16-th International Symposium on Intercalation Compound. Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Prague, 22-27 May, 2011.** p. 141
3. Л.А. Пасечник, С.П. Яценко, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**, Р.Ф. Самигулина. “Извлечение соединений редких и редкоземельных элементов из отходов глиноземного производства”. Материалы докладов **VI школы-семинар молодых ученых России “Проблемы устойчивого развития региона”**, г. Улан-Удэ, 14-19 июня 2011, с. 161-163.

4. G.V. Bazuev, A.P. Tyutyunnik, Yu.G. Zainulin, **M.V. Kuznetsov**, S.A. Ivanov, E.D. Politova, R. Mathieu, P. Nordblad. Synthetic Analog of Melanostibite Natural Mineral Mn_2FeSbO_6 : Synthesis, Structure, Dimorphism and Magnetic Properties. // **XVII International Conference on Crystal Chemistry, Diffraction and Spectroscopic Studies of Minerals**. 20-24 June, 2011, St. Petersburg State University, Russia.
5. **(Устный доклад – A.N. Enyashin)**, G. Seifert, Structure and Stability of Intralayer Faults in Layered Dichalcogenides // Abstracts of **Conference “Transition Metal Chalcogenide and Halide Nanostructures TMCN 2011”**, EPFL, Lausanne, Switzerland, June 6-8, 2011, P. 24.
6. **A. N. Enyashin**, G. Seifert, Structural Model for Fullerene-Like Nanoparticles of Layered Dichalcogenides // Abstracts of **Conference “Transition Metal Chalcogenide and Halide Nanostructures TMCN 2011”**, EPFL, Lausanne, Switzerland, June 6-8, 2011, P. 31.
7. (P.Yu. Glazyrina, **стендовый доклад – A. N. Enyashin**), Influence of Inorganic Fullerene-Like Particles on Polymer Crystallization // Abstracts of **Conference “Transition Metal Chalcogenide and Halide Nanostructures TMCN 2011”**, EPFL, Lausanne, Switzerland, June 6-8, 2011, P. 32.
8. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, О.И. Гырдасова, **Л.А. Переляева**, О.А. Кайгородова. “Синтез, морфология и спектральные характеристики нанодисперсного оксида Sc_2O_3 , допированного Eu^{3+} ”. Тезисы докладов Всероссийской молодежной конференции “Успехи химической физики”, г. Черноголовка, 21-23 июня 2011 г., с. 121.
9. **А.Н. Еняшин**, Глазырина П.Ю. “Влияние неорганических фуллереноподобных частиц на кристаллизацию полимеров”, Тез. докл. 1-й междисциплинарного международного симпозиума “Физика межфазных границ и фазовые переходы”, пос. Лоо, 19-23 сентября 2011 г., с. 68-70.
10. **А.Н. Еняшин**, “Разработка и апробация мезоскопической модели взаимодействия леннард-джонсовских атома и сферической наночастицы”, Тез. докл. VIII Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов “Физико-химия и технология неорганических материалов”, г. Москва, 15-18 ноября 2011 г., с. 161-162.
11. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева**. “Люминесцентные свойства наноразмерного ацетата скандия, допированного европием”. Тезисы докладов Всероссийской конференции “Фотоника органических и гибридных наноструктур”, г. Черноголовка, 5-9 сентября 2011 г., с. 31.
12. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева**. “Синтез и люминесцентные свойства наноразмерного диоксида титана, допированного ионами лантаноидов”. Тезисы Международного симпозиума “Нанофотоника-2011”, Украина, Крым (Кацивели), 3-8 октября 2011 г, с. С-8.
13. **Ya.V. Baklanova, T.A. Denisova, L.G. Maksimova** “NMR investigation of novel hydroxides $MO(OH)_2$ (M = Ti, Zr, Hf) oxyhydroxides” // Сборник трудов международной конференции “**Euromar 2011**” 21-25 августа 2011г, г. Франкфурт, Германия, с. 284.
14. **Я.В. Бакланова**, Л.Г. Максимова, **Т.А. Денисова** “Синтез и свойства оксигидроксидов состава $MO(OH)_2$ (M = Zr, Hf)” // Сборник тезисов молодежной конференции “**Экологобезопасные и ресурсосберегающие технологии и материалы**”, г. Улан-Удэ, 12-14 мая 2011г, с. 5.
15. **Я.В. Бакланова, Н.В. Таракина**, Л.Г. Максимова, **Т.А. Денисова** “Влияние дефектности структуры Li_2TiO_3 на реакционную активность соединения” // Тезисы докладов Всероссийской молодежной конференции “**Успехи химической физики**”, Черноголовка, 21-23 июня 2011г., с. 112.
16. N.V. Tarakina, **Ya.V. Baklanova, T.A. Denisova, L.G. Maksimova, R.B. Neder** “Defect crystal structure of $MO(OH)_2$ (M = Ti, Zr, Hf) oxyhydroxides” // **Сборника трудов XVII международного совещания по кристаллохимии, рентгенографии и спектроскопии минералов** г. Санкт-Петербург, 20-24 июня 2011г., с. 66-67.
17. А. В. Ищенко, **Я.В. Бакланова, Т.А. Денисова**, Л.Г. Максимова, Б.В. Шульгин “Влияние режима термообработки на рентгенолюминесцентные свойства Li_2HfO_3 ” // Сборник трудов Международного симпозиума “**Нанофотоника-2011**”, Украина, Крым (п. Кацивели), 3-8 октября 2011., с. С-9.
18. **Viktoria V. Ivanovskaya**, Alberto Zobelli, Odile Stйphan, Patrick R. Briddon, and Christian Colliex “Non stoichiometric BN domains included into carbon nanotubes” in: **Journées Scientifiques annuelles du groupe française d’Etudes de carbon**, Orbey, France, 2011. p. 52.

19. **Viktoria V. Ivanovskaya**, Alberto Zobelli, Dominique Teillet-Billy, Victor Sidis and Patrick R. Briddon “Atomic hydrogen adsorption and recombination onto ideal and defective graphitic surfaces” // *Ibid*, p.41
20. **(Устный) Viktoria V. Ivanovskaya**, Philipp Wagner, Alberto Zobelli, Malcolm I. Heggie, Patrick R. Briddon and Christopher P. Ewels. “Low energy graphene edge termination via small diameter nanotube formation” // **Nanotec11, International conference on carbon nanoscience and nanotechnology, Nantes**, France 2011. p. 25.
21. Ph. Wagner, C.P. Ewels, **V.V. Ivanovskaya**, P.R. Briddon, A. Pateau, V.Humbert. Chemical edge engineering of graphene nanoribbons’ // *Ibid*. p.112
22. **В.В. Банников, И.Р. Шени, А.Л. Ивановский** “Структурные, электронные свойства и химическая связь в слоистых оксихалькогенидах $LaMChO$ ($M = Cu, Ag; Ch = S, Se$) по данным FLAPW-GGA расчетов” // Тезисы докладов 14-го международного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, г. Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 14-19 сентября 2011 г, с.57-58.
23. **V.V. Bannikov, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii** “*Ab initio* modeling of 3d-metal impurities influence on the electronic and magnetic properties of zircon” //Abstracts of Moscow International Symposium on Magnetism (MISM), Moscow, 21-25 August 2011, p. 192.
24. **(Устный) М.В. Рыжков, И.Р. Шени, А.Л. Ивановский.** А.В. Мирмельштейн “Электронная структура плутониевых кластеров: от димера к твердому телу” //XI Международный семинар “**Фундаментальные свойства плутония**”, 12-16 сентября 2011г., Снежинск,с. 175-178.
25. 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 и электронное строение PuO_2 ” //XI Международный семинар “**Фундаментальные свойства плутония**”, 12-16 сентября 2011г., Снежинск,с. 211-215.