

## Список публикаций Николаева Александра Васильевича:

1. *Charge Ordering in Intermediate Band Crystals*, G.V. Ionova, Yu.N. Kostrubov and A.V. Nikolaev, *Physica Status Solidi(b)*, v. 134, N. 1, pp. 239-242 (1986).
2. *Электронная зонная структура гадолиния: ЛППВ расчет*, Г.В. Ионова, А.В. Николаев, *Металлофизика*, т. 10, вып. 5, с. 108-110 (1988).
3. *Isostructural  $\gamma$ - $\alpha$  Transition in Metallic Cerium as a Mott transition*, G.V. Ionova, A.V. Nikolaev, *Physica Status Solidi(b)*, v. 162, N. 2, pp. 451-460 (1990).
4. *Trend to Localization of f-states in Actinide Metals*, A.V. Nikolaev, G.V. Ionova, *Physica Status Solidi(b)*, v. 167, N.2, pp. 613-623 (1991).
5. *Особенности зонной структуры Np, Pu и Am*, А.В. Николаев, Г.В. Ионова, *Физика твердого тела*, т. 33, вып. 6, с. 1809-1815 (1991).
6. *Электронная структура актинидов от Th до Am и локализация f-состояний в Am*, Николаев, Г.В. Ионова, *Радиохимия*, т. 33, вып. 5, с. 515-520 (1991).
7. *Электронная зонная структура металлической фазы и переход метал-изолятор в VO<sub>2</sub>*, А.В. Николаев, Ю.Н. Кострубов, Б.В. Андреев, *Физика твердого тела*, т. 34, вып. 10, с. 3011-3018 (1992).
8. *Спин-поляризованные и спин-орбитальные взаимодействия в методе ЛППВ: приложение к 3d металлам*, А.В. Николаев, И.Т. Зураева, Г.В. Ионова, Б.В. Андреев, т. 35, вып. 2, с. 414-419 (1993).
9. *Электронная структура ферромагнитной фазы CrO<sub>2</sub>: ЛППВ расчеты*, А.В. Николаев, Б.В. Андреев, *Физика твердого тела*, т. 35, вып. 5, с. 1185-1189 (1993).
10. *Inelastic neutron scattering study of the intramolecular vibrations of the C<sub>70</sub> fullerene*, C. Christides, A.V. Nikolaev, T.J.S. Dennis, and K. Prassides; F. Negri, G. Orlandi, and F. Zerbetto, *Journal of Physical Chemistry*, v. 97, pp. 3641-3643 (1993).
11. *Molecular structure of C<sub>70</sub> fullerene*, A.V. Nikolaev, T.J.S. Dennis, K. Prassides, A.K. Soper, *Chemical Physics Letter*, v. 223, N. 3, pp. 143-148 (1994).
12. *Метод линеаризованных присоединенных плоских волн для квазиодномерных систем: карбин и нанотрубка (Sc@C<sub>20</sub>)*, П. Н. Дьячков, А. В. Николаев, *Доклады Академии Наук*, т. 344, вып. 5, с. 633-638 (1995).
13. *Bar Linearized Augmented Plane Wave Method - Carbine*, P.N. Dyachkov and A.V. Nikolaev, *Molecular Crystals and Liquid Crystals Science and Technology, Sect. C - Molec. Materials*, v.8, N. 1-2, pp. 135-140 (1996).
14. *Линейные присоединенные плоские волны в цепочечных системах*, П. Н. Дьячков, А. В. Николаев, *Химическая физика*, т. 15, вып. 5, pp. 34-45 (1996).
15. *Учет полного потенциала в методе линеаризованных присоединенных плоских волн для квазиодномерных электронных систем*, А. В. Николаев, П. Н. Дьячков, *Доклады Академии Наук*, т. 348, вып. 1, с. 57-61 (1996).
16. *Microscopic Theory of the Rhombohedral Phase and Transition to the Monoclinic Phase of Solid C<sub>70</sub>*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, *Physical Review B*, v. 54, N. 18, pp.12733-12743 (1996).
17. *Электронная структура фуллереновых нанотрубок, M@C<sub>20</sub>, легированных элементами первого переходного периода M = Sc, Ti, ..., Zn*, П. Н. Дьячков, А. В. Николаев, *Доклады Академии Наук*, т. 353, вып. 2, с. 203-206 (1997).
18. *Phase Transitions in AC<sub>60</sub> (A=Rb, Cs) fullerenes.*, A.V. Nikolaev, K. Prassides, K.H. Michel, *Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials*, edited by K.M. Kadish and R.S. Ruoff, v. 5, pp. 450-460 (1997).
19. *Charge Transfer and Polymer Phases in AC<sub>60</sub> (A = K, Rb, Cs) fullerenes*, A.V. Nikolaev, K. Prassides, K.H. Michel, *Journal of Chemical Physics*, v. 108, N. 12, pp. 4912-4923 (1998).
20. *Orientalional Disorder and Order in C<sub>60</sub>-Fullerite and in MC<sub>60</sub>-Alkali Metal Fullerenes*, A.V. Nikolaev, K.H. Michel, J.R.D. Copley, in the book "Correlations, coherence, and

- order”, edited by D.V. Shopova and D.I. Uzunov (Plenum Press, London-New York, 1999), pp. 183-214.
21. *Метод линейных присоединенных цилиндрических волн в теории электронной структуры нанопроводов*, П. Н. Дьячков, О.М. Кепп, А. В. Николаев, Доклады Академии Наук, т. 365, вып. 2, с. 215-220 (1999).
  22. *Quantum charge density fluctuations and the  $\gamma$ - $\alpha$  phase transition in Ce*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, European Physical Journal B, v. 9, pp. 619-634 (1999).
  23. *Electric quadrupole interactions and the  $\gamma$ - $\alpha$  phase transition in Ce: the role of conduction electrons*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, European Physical Journal B, v. 17, pp. 15-32 (2000).
  24. *Theory of Distinct Crystal Structures of Polymerized Fullerenes  $AC_{60}$ , A=K, Rb, Cs: The Specific Role of Alkalis*, K.H. Michel and A.V. Nikolaev, Physical Review Letters, v. 85, N. 15, pp. 3197-3200 (2000).
  25. *Microscopic theory of quadrupolar ordering in TmTe*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Physical Review B, v. 63, 104105 (10 pages) (2001).
  26. *Electronic structure and electric quadrupoles of a polymerized chain in solid  $AC_{60}$* , A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Solid State Communications, v. 117, pp. 739-743 (2001).
  27. *Theory of Crystal Structures of Polymerized  $C_{60}^-$  Fullerite and Fullerenes  $AC_{60}$ , A=K, Rb, Cs*, K.H. Michel, A.V. Nikolaev, and B. Verberck, in Proceedings of the conference on “Electronic Properties of Molecular Nanostructures: XV International Winterschool”, AIP Conf. Proceedings v. 591, ISBN 0-7354-0033-4, pp. 462-465 (2001).
  28. *Intra- site 4f-5d electronic correlations in the quadrupolar model of the  $\gamma$ - $\alpha$  phase transition in Ce*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Physical Review B, v. 66, 054103 (12 pages) (2002).
  29. *Molecular terms, magnetic moments, and optical transitions of molecular ions  $C_{60}^{m\pm}$* , A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Journal of Chemical Physics, v. 117, N. 10, pp.4761-4776 (2002).
  30. *Crystal Structures of Polymerized Fullerenes  $AC_{60}$ , A=K, Rb, Cs and Alkali-mediated Interactions*, B. Verberck, K.H. Michel, and A.V. Nikolaev, Journal of Chemical Physics, v. 116, N. 23, pp. 10462-10474 (2002).
  31. *Theoretical model for the structural phase transition at the metal-insulator transition in polymerized  $KC_{60}$* , B. Verberck, K.H. Michel, and A.V. Nikolaev, Physical Review B, v.66, 165425 (14 pages) (2002).
  32. *Solution of Periodic Poisson's Equation and the Hartree-Fock Approach for Solids with Extended Electron States: Application to Linear Augmented Plane Wave Method*, A.V. Nikolaev and P.N. Dyachkov, International Journal of Quantum Chemistry, v. 89, pp. 57-85 (2002).
  33. *Molecular Terms and Optical Transitions of  $C_{60}^{n\pm}$  Molecular Ions*, A.V. Nikolaev, and K.H. Michel, in Proceedings of the conference on “Structural and Electronic Properties of Molecular Nanostructures: XVI International Winterschool”, AIP Conf. Proceedings v. 633, ISBN 0-7354-0088-1, pp. 417-420 (2002).
  34. *Theoretical model for the structural phase transition in polymerized  $KC_{60}$* , B. Verberck, A.V. Nikolaev, and K.H. Michel, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, v. 129, NN. 2-3, pp. 133-137 (2003).
  35. *Symmetry lowering at the structural phase transition in  $NpO_2$  and  $UO_2$* , A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Physical Review B, v. 68, 054112 (7 pages) (2003).
  36. *Many Electron- and Hole Terms of Molecular Ions  $C_{60}^{n\pm}$* , A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Advances in Quantum Chemistry, v. 44, pp. 305-312 (2003).
  37. *Orientalional Charge Density Waves and the Metal-Insulator Transition in Polymerized  $KC_{60}$* , B. Verberck, A.V. Nikolaev, and K.H. Michel, AIP Conf. Proceedings v. 723, ISBN 0-7354-0204-3, pp. 339-342 (2004).

38. *Ab initio approach to superexchange interactions in alkali doped fullerenes AC<sub>60</sub>*, A.V. Nikolaev, and K.H. Michel, AIP Conf. Proceedings v. 723, ISBN 0-7354-0204-3, pp.393-396 (2004).
39. Comment on “*Group-theoretical analysis of the electronic structure data for molecular ions C<sub>60</sub><sup>N±</sup> (I<sub>n</sub>) derived from multipole expansion of the Coulomb interelectronic interactions*” [*J. Chem. Phys.* 119, 11429 (2003)], A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Journal of Chemical Physics, v.120, N. 17, p. 8334 (2004).
40. *Valence electronic charge density of distorted C<sub>60</sub><sup>-</sup> monomers in polymerized KC<sub>60</sub> and RbC<sub>60</sub>*, B. Verberck, V.N. Popov, A.V. Nikolaev, and D. Lamoen, Journal of Chemical Physics, v. 121, N. 1, pp. 321-327 (2004).
41. *Mercator maps of orientations of a C<sub>60</sub> molecule in single-walled nanotubes with distinct radii*, K. H. Michel, B. Verberck, and A. V. Nikolaev, AIP Conf. Proc. v. **786**, p. 69 (2005).
42. *Orientational charge density waves and the metal-insulator transition in polymerized KC<sub>60</sub>*, B. Verberck, A. V. Nikolaev and K. H. Michel, Physical Review B **71**, 165117 (2005).
43. *Multipole Coulomb interactions with several electrons per crystal site: crystal and mean field, symmetry lowering and loss of magnetic moments*, A.V. Nikolaev, Physical Review B, v.71, 165102 (2005).
44. *Superexchange and electron correlations in alkali fullerenes AC<sub>60</sub> (A = K, Rb, Cs)*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Journal of Chemical Physics, v. 122, 064310 (2005).
45. *Anisotropic Packing and One-Dimensional Fluctuations of C<sub>60</sub> Molecules in Carbon Nanotubes*, K.H. Michel, B. Verberck, and A.V. Nikolaev, Physical Review Letters, v. 95, 185506 (2005).
46. *Nanotube field and one-dimensional fluctuations of C<sub>60</sub> molecules in carbon nanotubes*, K.H. Michel, B. Verberck, and A.V. Nikolaev, European Physical Journal B v. 48, pp. 113-124 (2005).
47. *Diamagnetism of graphite and diamond*, A.V. Nikolaev and B. Verberck, in the book “Carbon-based magnetism”, Editors: T. Makarova and F. Palacio, Elsevier, ISBN-13: 978-0-444-51947-4, ISBN-10: 0-444-51947-5, pp. 245-278 (2006).
48. *The C<sub>60</sub> molecules in (C<sub>60</sub>)<sub>N</sub>@SWCNT peapods: crystal field, intermolecular interactions and dynamics*, B. Verberck, K.H. Michel, and A.V. Nikolaev, Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures, v. **14**, pp. 171-178 (2006).
49. *Theoretical study of molecular electronic excitations and optical transitions of C<sub>60</sub>*, A. V. Nikolaev, I. V. Bodrenko, and E.V. Tkalya, Physical Review A, v. **77**, 012503 (2008). (7 pages).
50. *Electronic and transport properties of rectangular graphene macro- molecules and zigzag carbon nanotubes of finite length*, A.V. Nikolaev, A.V. Bibikov, A.V. Avdeenkov, I.V. Bodrenko, and E.V. Tkalya, Physical Review B, v. 79, 045418 (2009).
51. *Elusive s-f intrasite interactions and double exchange in solids: ferromagnetic versus nonmagnetic ground state*, A.V. Nikolaev and K.H. Michel, Journal of Experimental and Theoretical Physics, v. 109, N. 2, pp. 286-292 (2009).
52. *Molecular Interaction Energies and Optimal Configuration of a Cubane Dimer*, A.V. Nikolaev, B. Verberck, and G.V. Ionova, Int. J. of Quantum Chemistry, v. 110, pp. 1063-1069 (2010)
53. *Nuclear <sup>111</sup>Cd probes detect hidden symmetry change at the γ→α transition in cerium considered isostructural for 60 years*, A.V. Tsvyashchenko, A.V. Nikolaev, A.I. Velichkov, A.V. Salamatin, L.N. Fomicheva, G.K. Ryasny, A.A. Sorokin, O.I. Kochetov and M. Budzynski, JETP, v. 111, No. 4, p. 627-634 (2010); ЖЭТФ т. 138, вып. 4(10), с. 709-716 (2010)
54. *Lowering of the spacial symmetry at the γ→α phase transition in cerium*, A.V. Tsvyashchenko, A.V. Nikolaev, A.I. Velichkov, A.V. Salamatin, L.N. Fomicheva, G.K.

- Ryasnny, A.A. Sorokin, O.I. Kochetov, M. Budzynski, and K.H. Michel, *Physical Review B*, v. 82, 092102 (2010).
55. А. В. Николаев, Б.Н. Плахутин. Фуллерен  $C_{60}$  как псевдоатом икосаэдрической симметрии. // *Успехи химии*, т. **79** (**9**) сс. 803-831 (2010).  
[English edition: A.V. Nikolaev, B.N. Plakhutin.  $C_{60}$  fullerene as a pseudoatom of the icosahedral symmetry. // *Russian Chemical Reviews* **79** (**9**) 729 - 755 (2010)]
56. А.В. Авдеенков, А.В. Бибиков, И.В. Бодренко, А.В. Николаев, Е.В. Ткаля. Квантовомеханические ab initio расчеты распределения электронной плотности и вероятности ядерного К-захвата в системе  $7\text{Be}@C_{60}$  и в металлическом бериллии. "Известия вузов. Физика". - 2010. - Т. 53. - N 3/2, с.3-7.
57. А.В. Авдеенков, А.В. Бибиков, И.В. Бодренко, А.В. Николаев, Е.В. Ткаля. Электронные и транспортные свойства конечного прямоугольного листа графена и углеродных нанотрубок конечной длины. "Известия вузов. Физика". - 2010. - Т. 53. - N 3/2, с.8-13.