

Сведения об оппоненте

по диссертационной работе **Нурсултана Сагатова**

«Первопринципное исследование фазовых соотношений и упругих свойств в системах металл–легкий элемент при высоких давлениях», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Фамилия, имя, отчество	Еремин Николай Николаевич
Ученая степень и отрасль науки	Доктор химических наук,
Шифр и наименование специальности, по которой защищена диссертация	25.00.05 минералогия, кристаллография
Ученое звание	член-корреспондент РАН с 2019 г. доцент по кафедре кристаллографии и кристаллохимии 2001 г.
Полное наименование организации, являющейся основным местом работы оппонента, ведомственная принадлежность	ФГБОУ ВО Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Геологический факультет
Занимаемая должность, подразделение	Заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии, и.о. декана факультета
Почтовый индекс, адрес	119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, оф.523
Телефон, e-mail	8(495) 939-2970
Список основных публикаций официального оппонента по теме диссертации в рецензируемых изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)	1. Ca- and Mg-Perovskite Phases in the Earth's Mantle as a Probable Reservoir of Al: Computer Simulation Evidence // Moscow University Geology Bulletin. vol. 72, n. 5, pp. 299-304, 2017. Соавторы: Marchenko E.I., Bychkov A.Yu, Grechanovskii A.E. 2. Атомные модели структуры силицидов ниобия в in-situ композитах Nb-Si // Журнал структурной химии. том 58, н. 3, с. 547- 553, 2017. Соавторы: Каблов Е.Н., Кузьмина Н.А., Светлов И.Л., Нейман А.В. 3. Diffusion Paths for Interstitial Impurities in Different Polymorphic Modifications of Niobium Silicide Nb ₅ Si ₃ // Crystallography Reports. vol. 63, n. 3, pp. 323-330, 2018. Соавторы: Kuzmina N.A., Marchenko E.I., Svetlov I.L., Muromtsev N.A., Neuman A.V., Yakushev D.A. 4. Неорганическая кристаллохимия. Книга 1 (монография) // Изд-во: Книжный дом, Университет (КДУ), Москва, 2018, 394 стр. Соавтор: Еремина Т.А. 5. Energetic Substantiation of the Formation of Ytterbium Dimers in Single Forsterite Crystals // Physics of the Solid State. vol. 61, n. 4, pp. 614-617, 2019. Соавторы: Dudnikova V.B., Zharikov E.V., Lis D.A. 6. Estimation of Accumulation of Chromium Ion Impurities in the CaSiO ₃ and MgSiO ₃ Phases of the

	Earth's Lower Mantle at Pressures of 18–25 GPa // Doklady Earth Sciences. vol. 488, n. 2, pp. 1203-1206, 2019. Соавторы: Marchenko E.I., Bobrov A.V. 7. Solid solutions of monazites and xenotimes of lanthanides and plutonium: Atomistic model of crystal structures, point defects and mixing properties // Computational Materials Science. vol. 157, pp. 43-50, 2019. Соавторы: Marchenko E.I., Petrov V.G., Mitrofanov A.A., Ulanova A.S. 8. Transferable Approach of Semi-Empirical Modeling of Disordered Mixed Halide Hybrid Perovskites $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$: Prediction of Thermodynamic Properties, Phase Stability and Deviations from Vegard's Law // Journal of Physical Chemistry C. vol. 123, n. 42, pp. 26036-26040, 2019. Соавторы: Marchenko E.I., Fateev S.A., Petrov A.A., Goodilin E.A., Tarasov A.B. 9. Моделирование твердых растворов $\text{NaGd}(\text{MoO}_4)_2$- $\text{NaEu}(\text{MoO}_4)_2$ и $\text{Na}_2\text{Gd}_4(\text{MoO}_4)_7$-$\text{Na}_2\text{Eu}_4(\text{MoO}_4)_7$ методом межатомных потенциалов // Физика твердого тела. том 61, н. 4, с. 678-687, 2019. Соавторы: Дудникова В.Б., Жариков Е.В. 10. On the crystal-chemical “flexibility” of the NiAs structure type // Crystallography Reports. vol. 65, n. 2, pp. 191-196, 2020. Соавторы: Artamonova A.A., Gostishcheva N.D., Kochetkova E.M., Mezhueva A.A. 11. Synthesis and crystal structures of new highpressure phases CaAl_2O_4 and $\text{Ca}_2\text{Al}_6\text{O}_{11}$ // Lithos. vol. 374, pp. 105689, 2020. Соавторы: Iskrina A., Spivak A., Bobrov A., Marchenko E., Dubrovinsky L. 12. Transferable and extensible machine learning derived atomic charges for modeling hybrid nanoporous materials // печатная Chemistry of Materials. pp. acs.chemmater.0c02468, 2020. Соавторы: Korolev V.V., Mitrofanov A., Marchenko E.I., Tkachenko V., Kalmykov S.N. 13. Plutonium-Doped Monazite and Other Orthophosphates—Thermodynamics and Experimental Data on Long-Term Behavior // Sustainability. vol. 13, n. 3, pp. 1203-1203, 2021. Соавторы: Mikhailova Polina, Burakov Boris, Averin Alexei, Shiryayev Andrey 14. Relationships between Distortions of Inorganic Framework and Band Gap of Layered Hybrid Halide Perovskites // Chemistry of Materials. vol. 3, n. 9, pp. acs.chemmater.1c02467, 2021. Соавторы: Marchenko E.I., Korolev V.V., Fateev S.A., Mitrofanov A., Goodilin E.A., Tarasov A.B. 15. Estimation of the Mechanisms of Incorporation of a Titanium Impurity in the Composition of MgSiO_3
--	--

	Bridgmanite // Doklady Earth Sciences. vol. 503, n. 2, pp. 175-178, 2022. Соавтор: Bobrov A.V.
--	--