

## Сведения о научном руководителе

диссертации Марченко Екатерины Игоревны

«Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава»

Научный руководитель: Еремин Николай Николаевич

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: доцент, профессор РАН

Должность заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова

Место работы: геологический факультет, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

Адрес места работы: 119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, 1А, Геологический факультет, А437.

Тел.: 8-495-939-5575

E-mail: neremin@geol.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности \_25.00.05 – минералогия, кристаллография за последние 5 лет:

- 1) *Eremin N.N., Marchenko E.I., Petrov V.G., Mitrofanov A.A., Ulanova A.S.* Solid solutions of monazites and xenotimes of lanthanides and plutonium: Atomistic model of crystal structures, point defects and mixing properties. *Computational Materials Science*, 2019, том 157, с. 43-50.
- 2) *Еремин Н.Н., Еремина Т.А.* Неорганическая кристаллохимия. Книга 1. Книжный дом Университет (КДУ) Москва, 2018, ISBN 978-5-91304-763-2, 394 с.
- 3) *Кузьмина Н.А., Еремин Н.Н., Марченко Е.И., Светлов И.Л., Муромцев Н.А., Нейман А.В., Якушев Д.А.* Пути диффузии примесей внедрения в силициде ниобия Nb<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> различных полиморфных модификаций. *Кристаллография*, 2018, том 63, № 3, с. 358-365.
- 4) *Marchenko E.I., Eremin N.N., Bychkov A.Yu, Grechanovskii A.E.* Ca- and Mg-Perovskite Phases in the Earth's Mantle as a Probable Reservoir of Al: Computer-Simulation Evidence. *Moscow University Geology Bulletin*, том 72, № 5, с. 299-304.
- 5) *Eremin N.N., Grechanovsky A.E., Marchenko E.I.* Atomistic and ab-initio modeling of CaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> high-pressure polymorphs under Earth's mantle conditions. *Crystallography Reports*, 2016, том 61, № 3, с. 432-442.

- 6) *Grechanovsky A.E., Urusov V.S., Eremin N.N.* Molecular dynamics study of self-radiation damage in mineral matrices. *Journal of Structural Chemistry*, том 57, № 6, с. 1243-1262.
- 7) *X. Liu, Vinograd V.L., X. Lu, Leonenko E.V., Eremin N.N., R.Wang, B.Winkler* Thermodynamics of mixing in an isostructural solid solution: simulation methodologies and application to rutile-cassiterite. *American Mineralogist*, 2016, том 101, № 5, с. 1197-1206.
- 8) *Дудникова В.Б., Еремин Н.Н.* Моделирование локальной структуры, свойств смешения и стабильности твердых растворов  $Ba_xSr_{1-x}CO_3$  методом межатомных потенциалов. *Физика твердого тела*, 2016, том 58, № 6, с. 1068-1073.
- 9) *Eremin N.N., Protasov N., Hrechanivskyi O.* Molecular dynamics modeling of radiation stability of  $Ca(Zr,Ti,Sn)O_3$  perovskites. *Acta Cryst. Sec. A*, т. 71, № A1, с. S333-S334.
- 10) *Urusov V.S., Eremin N.N.* Local structure of solid solutions from the computer simulation results and experimental data. *Journal of Structural Chemistry*, том 56, № 4, с. 737-751 (2015)

Ученый секретарь диссертационного  
совета МГУ.04.02,  
доктор химических наук,  
профессор

Белоконева Е.Л.