

Сведения об официальных оппонентах

по диссертации *Марченко Екатерины Игоревны*

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

Ф.И.О.: Блатов Владислав Анатольевич

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: профессор

Научная специальность: 02.00.01 – «неорганическая химия»

Должность: директор Международный научно-исследовательский центра по теоретическому материаловедению

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Самарский государственный технический университет»

Адрес места работы: 443068, г. Самара, ул. Академика Павлова, д.1, к. 22в, к. Л-17.

Тел. : +7(846) 335-67-98

E-mail: blatov@samsu.ru

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Bushlanov, P. V., **Blatov V. A.**, & Oganov, A. R. Topology-based crystal structure generator // Computer Physics Communications 2019. V. 236. Pp. 1-7.
2. Fedotov, S. S., Kabanova, N. A., Kabanov, A. A., **Blatov, V. A.**, Khasanova, N. R., & Antipov, E. V. Crystallochemical tools in the search for cathode materials of rechargeable Na-ion batteries and analysis of their transport properties // Solid State Ionics. 2018. V. 314. Pp. 129-140.
3. Eremin, R. A., Kabanova, N. A., Morkhova, Y. A., Golov, A. A., & **Blatov, V. A.** High-throughput search for potential potassium ion conductors: A combination of geometrical-topological and density functional theory approaches // Solid State Ionics. 2018. V. 326. Pp. 188–199.
4. Akhmetshina, T. G., **Blatov, V. A.**, Proserpio, D. M., & Shevchenko, A. P. Topology of Intermetallic Structures: From Statistics to Rational Design // Accounts of Chemical Research. 2017. V. 51(1). Pp. 21–30.
5. Kuznetsova E.D., Blatova **O.A.**, **Blatov V.A.** Predicting new zeolites: a combination of thermodynamic and kinetic factors // Chemistry of materials. 2018. V. 30. № 8. Pp. 2829-2837.

6. Michael W. Anderson, James T. Gebbie-Rayet, Adam R. Hill, Nani Farida, Martin P. Attfield, Pablo Cubillas, **Vladislav A. Blatov**, Davide M. Proserpio, Duncan Akporiaye, Bjørnar Arstad, & Julian D. Gale. Predicting crystal growth via a unified kinetic three-dimensional partition model // Nature. 2017. V. 544(7651). Pp. 456–459.
7. Медриш И.В., Салеев В.А., **Блатов В.А.** Комбинированный топологический и квантовомеханический подход в прогнозировании новых кристаллических структур: применение к простым сульфатам, селенатам, сульфидам и селенидам // Программа и тезисы VIII Национальной кристаллохимической конференции. 2016. С. 176.
8. **Блатов В.А.** Топологические методы анализа и моделирования кристаллических веществ // Программа и тезисы VIII Национальной кристаллохимической конференции. 2016. С. 30.
9. **Blatov V.A.** A method for topological analysis of ROD packings // Structural Chemistry. 2016. V. 27. № 6. Pp. 1605-1611.
10. Alexandrov E.V., Shevchenko A.P., **Blatov V.A.**, Asiri A.A. New knowledge and tools for crystal design: Local coordination versus overall network topology and much more // CrystEngComm. 2015. V. 17. № 15. Pp. 2913-2924.
11. Александров Е.В., **Блатов В.А.**, Прозерпио Д.М. Взаимопроникновение трехпериодических сеток в кристаллических структурах: методы описания и классификации, геометрико-топологические условия реализации // Журнал структурной химии. 2014. Т. 55. № S1. С. 126-144.

Ф.И.О.: Кусков Олег Львович

Ученая степень: доктор химических наук

Ученое звание: член-корреспондент РАН

Научная специальность: 04.00.02 – «геохимия»

Должность: заведующий лабораторией термодинамики и математического моделирования природных процессов

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук (ГЕОХИ РАН)

Адрес места работы: 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.19.

Тел.: +7(495) 137-86-14

E-mail: ol_kuskov@mail.ru

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. **Kuskov O.L.**, Kronrod E.V., Kronrod V.A. Thermo-chemical constraints on the lunar bulk composition and the structure of a three-layer mantle // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2019. V. 286. Pp. 1-12.
2. **Кусков О.Л.**, Кронрод Е.В., Кронрод В.А. Геохимические ограничения на «холодные» и «горячие» модели внутреннего строения Луны: 2. Состав трехслойной мантии // *Астрономический вестник. Исследования солнечной системы*. 2019. Т. 53, № 1
3. Кронрод Е.В., Кронрод В.А., **Кусков О.Л.**, Нефедьев Ю.А. Геохимические ограничения на валовый состав Луны // *Doklady Earth Sciences*. 2018. V. 483. № 1. Pp. 1475-1479.
4. **Kuskov O.L.**, Belashchenko D.K. Thermodynamic properties of Fe-S alloys from molecular dynamics modeling: Implications for the lunar fluid core // *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 2016. V. 258. Pp. 43-50.
5. **Кусков О.Л.**, Белашченко Д.К. Оценка термодинамических свойств флюидных Fe-S ядер Луны, Ио, Европы и Ганимеда методом молекулярной динамики // *Астрономический вестник. Исследования солнечной системы*. 2016. Т. 50. № 3. С. 177-196.
6. Дунаева А.Н., Кронрод В.А., **Кусков О.Л.** Физико-химические модели внутреннего строения частично дифференцированного Титана // *Геохимия*. 2016. № 1. С. 32-56.
7. Белашченко Д.К., **Кусков О.Л.** Оценка термодинамических характеристик Fe-S ядра Луны методом молекулярно-динамического моделирования // *Доклады Академии наук*. 2015. Т. 460. № 1. С. 70-73.
8. Раевский С.Н., Гудкова Т.В., **Кусков О.Л.**, Кронрод В.А. О согласовании моделей внутреннего строения Луны с данными гравитационного поля // *Физика Земли*. 2015. Т. 1. С. 139-147.
9. **Кусков О.Л.**, Кронрод В.А., Кронрод Е.В. Термохимические ограничения на тепловой режим, состав и минералогию верхней мантии Луны по сейсмическим моделям // *Астрономический вестник. Исследования солнечной системы*. 2015. Т. 49. № 1. С. 1-17.
10. **Kuskov O.L.**, Kronrod V.A., Prokofyev A.A., Pavlenkova N.I. Thermo-chemical structure of the lithospheric mantle underneath the Siberian craton inferred from long-range seismic profiles // *Tectonophysics*. V. 615. Pp. 154-166.

Ф.И.О.: Мохов Андрей Владимирович

Ученая степень: доктор геолого-минералогических наук

Ученое звание:

Научная специальность: 25.00.05 – «минералогия, кристаллография»

Должность: заведующий лабораторией

Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии Российской академии наук (ИГЕМ РАН), лаборатория кристаллохимии минералов имени академика Н.В. Белова

Адрес места работы: 119017, Москва, Старомонетный пер., 35.

Тел.: +7 (499) 230-82-55

E-mail: avm@igem.ru

Список основных публикаций по теме рецензируемой диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет:

1. Gornostaeva T.A., **Mokhov A.V.**, Kartashov P.M., Bogatikov O.A. Cosmogenic Substances in the Zhamanshin Crater // Doklady Earth Sciences. 2018. V. 478. № 2. Pp. 204-207.
2. **Mokhov A.V.**, Gornostaeva T.A., Kartashov P.M., Rybchuk A.P., Bogatikov O.A. Native Alloys of the Pd–Pt and Ni–Cu–Al Systems from the AS Luna-24 // Doklady Earth Sciences. 2018. V. 481. № 1. Pp. 898-901.
3. Kartashov P.M., **Mokhov A.V.**, Gornostaeva T.A., Bogatikov O.A. Signs of Hydrothermal Activity in Lunar Rocks according to the Data of a Regolith Investigation // Doklady Earth Sciences. 2018. V. 480. № 2. Pp. 810-813.
4. **Мохов А.В.**, Карташов П.М., Рыбчук А.П., Горностаева Т.А., Богатиков О.А. // Доклады Академии наук. 2018. Т. 478. № 3. С. 332-334.
5. Trigub A.L., Tagirov B.R., Kvashnina K.O., Chareev D.A., Nickolsky M.S., Shiryayev A.A., Baranova Nina N., Kovalchuk Elena V., **Mokhov Andrey V.** X-ray spectroscopy study of the chemical state of “invisible” Au in synthetic minerals in the Fe-As-S system // American Mineralogist. 2017. V. 102. № 5. Pp. 1057-1065.
6. Юдинцев С.В., Первухина А.М., **Мохов А.В.**, Мальковский В.И., Стефановский С.В. Влияния раскристаллизации фосфатного стекла на устойчивость матрицы отходов к

- выщелачиванию // Доклады Академии наук. 2017. Т. 473. № 4. С. 477-483.
7. Горностаева Т.А., **Мохов А.В.**, Карташов П.М., Богатиков О.А. Конденсатные стекла кратера Жаманшин. I. Иргизиты // Петрология. 2016. Т. 24. № 1. С. 3-24.
 8. Карташов П.М., Горностаева Т.А., **Мохов А.В.**, Богатиков О.А. Природная высокобарическая фаза кубического CdSe в компактном стекле кратера Жаманшин (Центральный Казахстан) // Доклады Академии наук. 2016. Т. 467. № 6. С. 698-700.
 9. Горностаева Т.А., **Мохов А.В.**, Карташов П.М., Богатиков О.А. Конденсатный компонент в импактных стеклах кратера Жаманшин // Доклады Академии наук. 2015. Т. 464. № 1. С. 91-95.
 10. Слукин А.Д., Бортников Н.С., Жухлистов А.П., **Мохов А.В.**, Боева Н.М., Жегалло Е.А., Зайцева Л.В. Микроморфология и генетические взаимоотношения главных гипергенных минералов бокситоносных латеритных профилей (по результатам электронно-микроскопического изучения) // Новые данные о минералах. 2015. № 50. С. 50-61.
 11. **Мохов А.В.**, Горностаева Т.А., Карташов П.М., Асадулин Эн Э., Богатиков О.А. Нанокристаллы самородных железа и титана в импактных стеклах лунного реголита // Доклады Академии наук. 2015. Т. 460. № 4. С. 441-445.
 12. **Мохов А.В.**, Горностаева Т.А., Карташов П.М., Богатиков О.А. Селективные европиевая и цериевая фазы в реголите из Моря Кризисов // Доклады Академии наук. 2015. Т. 465. № 1. С. 87-90.
 13. Gornostaeva T.A., **Mokhov A.V.**, Kartashov P.M., Bogatikov O.A. Native hafnium from the continental regolith probe // Doklady Earth Sciences. 2014. V. 456. № 1. Pp. 545-547.

Ученый секретарь

диссертационного совета МГУ.04.02,

доктор химических наук,

профессор

Белоконева Е.Л.