

Председателю диссертационного совета
24.2.315.09, созданного на базе ФГБОУ ВО
«Кемеровский государственный университет»
Д.ф-м.н., профессору Каленскому А.В.

Сведения о ведущей организации

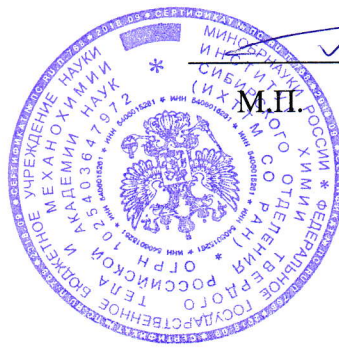
по диссертации Тимофеева Вячеслава Сергеевича на тему «Теоретическое исследование физико-химических свойств соединений X_2NA ($X = Mg, Ca; A = F, Cl, Br, I$) со структурой антихалькопирита», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия.

Полное наименование организации в соответствии с уставом	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН), г. Новосибирск.
Адрес	630090, г.Новосибирск, ул. Кутателадзе 18.
Руководитель	Немудрый Александр Петрович
Сайт организации	http://solid.nsc.ru/
Контактное лицо	Зильберберг Игорь Леонидович, д.х.н., главный научный сотрудник группы теоретической и вычислительной химии твердого тела, (383) 233-24-10 *1169, zilberberg@solid.nsc.ru
Публикации ведущей организации по теме диссертации (за последние 5 лет)	
1. Theoretical and experimental determination of work function of $HfIr_xB_y$ compounds / V. V. Lozanov, Ya. A. Nikiforov, M. A. Golosov [et al.] // Applied Surface Science. – 2026. – Vol. 716. – P. 164629. – DOI 10.1016/j.apsusc.2025.164629. – EDN QDVJYK. 2. Unraveling the “O–” electron state in perovskites on the example of $SrFeO_3$ by means of plane-wave DFT / N. A. Afimchenko, A. A. Shubin, I. L. Zilberberg, A. P. Nemudry // Solid State Ionics. – 2026. – Vol. 438. – P. 117153. – DOI 10.1016/j.ssi.2026.117153. – EDN LJGMGK. 3. The stability and conductive properties of the MNb_2O_6 phases ($M = Ba, Sr$): full theoretical and experimental study / Ye. A. Morkhova, A. V. Egorova, M. S. Koroleva [et al.] // Journal of Applied Electrochemistry. – 2025. – Vol. 55, No. 11. – P. 2925-2935. – DOI 10.1007/s10800-025-02353-7. – EDN XDERAE.	

4. Quantum modelling of magnetism in strongly correlated materials: Evaluating constrained DFT and the Hubbard model for Y114 / Ch. Tantardini, D. Fazylbekova, S. V. Levchenko, I. S. Novikov // Computational Materials Science. – 2025. – Vol. 246. – P. 113465. – DOI 10.1016/j.commatsci.2024.113465. – EDN BMXDRF.
5. Гайнутдинов, И. И. Сравнительное исследование электронной и структурной стабильности индивидуальных перовскитных оксидов (Ba, Sr, La)(Fe, Co)O_{3-x} методом DFT+U / И. И. Гайнутдинов // Журнал структурной химии. – 2025. – Т. 66, № 11. – С. 155361. – DOI 10.2692/JSC_id155361. – EDN ACCUUQ.
6. Гайнутдинов, И. И. Компьютерное моделирование процессов диффузии в тетрафтороборатах тетра-н-алкиламмония (C_kH_{2k+1})₄NBF₄ (k = 1-4) / И. И. Гайнутдинов, Н. Ф. Уваров // Химия в интересах устойчивого развития. – 2025. – Т. 33, № 3. – С. 315-321. – DOI 10.15372/KhUR2025655. – EDN OCBWPK.
7. Ab Initio and Experimental Raman Study of Rare-Earth Oxide Phases in (Y_{0.2}Eu_{0.2}Gd_{0.2}La_{0.2}Er_{0.2})₂O₃ High-Entropy Ceramics / E. A. Buntov, M. I. Melnikova, A. N. Kiryakov [et al.] // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2025. – Vol. 89, No. S3. – P. S428-S434. – DOI 10.1134/S1062873825714746. – EDN KSSPZU.
8. Гайнутдинов, И. И. Моделирование методом молекулярной динамики особенностей структуры и подвижности ионов органических солей [N(C_nH_{2n+1})₄]BF₄ (n = 2, 4) / И. И. Гайнутдинов, Н. Ф. Уваров, М. Дун // Журнал структурной химии. – 2023. – Т. 64, № 11. – С. 118463. – DOI 10.26902/JSC_id118463. – EDN LVHJX.
9. Гайнутдинов, И. И. Особенности электронной структуры кислороддефицитных перовскитов SrFe_{1-x}Mo_xO_{3-y} / И. И. Гайнутдинов // Электрохимия. – 2023. – Т. 59, № 4. – С. 187-192. – DOI 10.31857/S0424857023040060. – EDN AOEBVF.
10. Gainutdinov, I. I. Molecular Dynamic Simulation of the [N(C₄H₉)₄]BF₄ / (110) α-Al₂O₃ Interface / I. I. Gainutdinov, N. F. Uvarov // Chimica Techno Acta. – 2023. – Vol. 10, No. 3. – P. 202310308. – DOI 10.15826/chimtech.2023.10.3.08. – EDN LCAPXC.

Директор ИХТТМ СО РАН

д.х.н., член-корр. РАН



М.П.

/Немудрый А.П.