# СВЕДЕНИЯ

об официальном оппоненте

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Фамилия, Имя, Отчество (полностью) | Место основной работы - полное наименование организации (с указанием полного почтового адреса, телефона (при наличии), адреса электронной почты (при наличии)), должность, занимаемая им в этой организации (полностью с указанием структурного подразделения) | Ученая степень (с указанием отрасли наук, шифра и наименования научной специальности, по которой им защищена диссертация в соответствии с действующей Номенклатурой специальностей научных  работников) | Ученое звание |
| **Медведева Надежда Ивановна** | ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук,  620990, Екатеринбург, ГСП,  ул. Первомайская, 91  (343) 374-5219  главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии и спектроскопии им. профессора  А.Л. Ивановского | Доктор физико– математических наук,  02.00.21 – химия твердого тела | Старший научный сотрудник |
| Основные публикации по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за  последние 5 лет (не более 15 публикаций): | | | |
| 1. Медведева, Н.И. Электронная структура и квадрупольные взаимодействия в перспективных катодных материалах NaxMy(MoO4)3, M = Mn, Fe, Co и Ni / Н.И. Медведева, А.В. Сердцев // Физика твердого тела. – 2019. – V. 61. – P. 828–835. 2. Medvedeva, N.I. Mechanism of Sodium-Ion Diffusion in Alluaudite-Type Na5Sc(MoO4)4 from NMR Experiment and Ab Initio Calculations / Medvedeva N.I., Skachkov A.V., Baklanova Y.V., Denisova T.A., Buzlukov A.L., Savina A.A., Khaikina E.G., Morozov V.A., Animitsa I.E., Solodovnikov S.F. // J. Phys. Chem. C. – 2019. – V. 123. – P. 4729−4738. 3. Medvedeva, N.I. Ab initio insights into Na-ion diffusion and intercalation mechanism in alluaudite NaxMn2(MoO4)3 as cathode material for sodium-ion batteries / A.V. Serdtsev, N.I. Medvedeva // J. Al. Comp. – 2019. – V. 808. – № 151667. 4. Medvedeva, N.I. Sodium diffusion and redox properties of alluaudite Na2+2xM2-x(MoO4)3 (M = Fe, Co, Ni) from DFT+U study / A.V. Serdtsev, S.F. Solodovnikov, N.I. Medvedeva // Mater. T. Comm. – 2020. – V. 22. – № 100825. 5. Medvedeva, N.I. Electronic structure and sodium-ion diffusion in glaserite-type *A*3-*х*Na1+*х*(MoO4)2   (*A* = Cs, K) studied with first-principles calculations / A.V. Serdtsev, D.V. Suetin, S.F.Solodovnikov,  O.A. Gulyaeva, N.I. Medvedeva, // Sol. St. Ion. – 2020. – V. 357. – № 115484.  6. Medvedeva, N.I. Ab initio simulation of oxygen vacancies in LiMgPO4 / N. I. Medvedeva, .D. G. Kellerman, M.O. Kalinkin // [Mater. Res. Exp.](https://iopscience.iop.org/journal/2053-1591) – 2019. – V. 6. – № 106304. | | | |

1. Medvedeva, N.I. New Li-Mg phosphates with a 3D framework: experimental and ab initio calculations / D.G. [Kellerman,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004486800) A.P. [Tyutyunnik,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7003349662) N.I. [Medvedeva,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7102253561) [A. Yu. Chufarov,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7102253561) [A. D.](https://pubs.rsc.org/en/results?searchtext=Author%3AA.%20D.%20Fortes)  [Fortes,](https://pubs.rsc.org/en/results?searchtext=Author%3AA.%20D.%20Fortes) [A. S. Gibbs,](https://pubs.rsc.org/en/results?searchtext=Author%3AA.%20S.%20Gibbs) [N. V. Tarakina,](https://pubs.rsc.org/en/results?searchtext=Author%3AN.%20V.%20Tarakina) [M. O. Kalinkin](https://pubs.rsc.org/en/results?searchtext=Author%3AM.%20O.%20Kalinkin), N.A [Zhuravlev,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7003347642) O.N. [Leonidova](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=6603861279) // Dal. Trans. – 2020. – V. 49. – P. 10069–10083.
2. Medvedeva, N.I. An insight into indium effect on the crystal structure and thermoluminescence of LiMgPO4: Combined experiment and ab initio calculations / D.G. [Kellerman,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004486800) [M. O. Kalinkin](https://pubs.rsc.org/en/results?searchtext=Author%3AM.%20O.%20Kalinkin),

A.P. [Tyutyunnik,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7003349662) N.I. [Medvedeva,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7102253561) R.M. [Abashev,](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56154773000) A.L. [Surdo](https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36724773300) // J. Al. Comp. – 2020. – V. 846. – № 156242.

1. Medvedeva, N.I. Sodium-ion diffusion in alluaudite Na5In(MoO4)4 / A.L. Buzlukov, N.I. Medvedeva, Y.V. Baklanova, A.V. Skachkov, A.A. Savina, I.E. Animitsa, Т.А. Denisova, E.G. Khaikina // Sol. St. Ion. – 2020. – V. 51. – № 115328.
2. Medvedeva, N.I. Coexistence of three types of sodium motion in double molybdate Na9Sc(MoO4)6: 23Na and 45Sc NMR data and ab initio calculations / A. L. Buzlukov, I.Yu. Arapova,

Y.V. Baklanova, N. I. Medvedeva, T.A. Denisova, A.A. Savina, B.I. Lazoryak, E.G. Khaikina,

M.Bardet // Phys. Chem. Chem. Phys. – 2020. – V. 22. – P. 144–147.

1. Medvedeva, N.I. First-principles study of structure, magnetic properties, and stability of η- carbides (M,Fe)3W3C (M = Ti, V, Cr, Mn, Co, and Ni) / D.V. Suetin, N.I. Medvedeva // Phys. St. Sol. (B) – 2019. – V. 256. – № 1900108.
2. Medvedeva, N.I. Structural, electronic and magnetic properties of η-carbides M3W3C (M = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) / D.V. Suetin, N.I. Medvedeva // J. Al. Comp. – 2016. – V. 681. – P. 508–515.
3. Medvedeva, N.I. First-Principles Study of intrinsic defects in CdO / V.P. Zhukov, N.I. Medvedeva, V.N. Krasilnikov // [Int. J. Mod. Phys.](https://www.elibrary.ru/contents.asp?id=35494841) – 2018. – V. 32. – № 1850059.
4. Medvedeva, N.I. First-Principles Study of phosphorus embrittlement in austenitic steels with κ- carbide precipitates / N.I. Medvedeva, D.C. Van Aken, J.E. Medvedeva // [Comp. Mater. Sc.](https://www.elibrary.ru/contents.asp?id=34585102) – 2017.

– V. 138. – P. 105–110.

1. Medvedeva, N.I. Deformation behavior of Mo5SiB2 / N.I. Medvedeva, O.Y. Kontsevoi, A.J. Freeman, J.H. Perepezko // [Intermet.](https://www.elibrary.ru/contents.asp?id=34587509) – 2017. – V. 90. – P. 54–57.