

Отзыв

на автореферат диссертации МАРЧЕНКО Екатерины Игоревны «Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 «минералогия, кристаллография»

Диссертационная работа Е.И. Марченко посвящена получению новых данных о кристаллических структурах и физических свойствах мантийных минеральных фаз переменного состава в широком диапазоне Р–Т условий на основе разработанной с участием автора модели потенциалов межатомного взаимодействия для твердых растворов. Особая актуальность работы связана с крайней ограниченностью прямой минералогической информации о фазовом и химическом составе глубинных оболочек Земли. Так как результаты физико-химических экспериментов не всегда способны полностью адекватно воспроизвести специфику фазовых ассоциаций мантии Земли, используемое автором атомистическое и квантово-химическое моделирование в ряде случаев может служить надежным дополнением к минералогической и экспериментальной информации.

Существенной отличительной чертой проведенных исследований является проведение моделирования с учетом формирования большинством мантийных фаз серий твердых растворов. Это позволило диссертанту затронуть важную геохимическую проблему межфазового распределения примесных компонентов (в частности, калия, натрия и редкоземельных элементов в мантийных минералах со структурой перовскита), которые, хотя и имеют очень невысокие концентрации в мантии Земли, способны накапливаться в мантийных фазах, оказывая существенно влияние на их физические свойства и параметры превращений. Весьма интересен также блок исследований, связанных с предсказанием вероятных, ранее неизвестных структур кристаллических фаз, которые потенциально могут существовать в мантии Земли.

Таким образом, теоретическая и практическая значимость представленной диссертации не вызывает сомнения. Работа прошла необходимую апробацию, ее результаты опубликованы в трех статьях в реферируемых научных изданиях, а еще две статьи приняты к печати и появятся в ближайшее время. Автореферат написан грамотным научным языком и содержит убедительное обоснование защищаемых положений.

Считаю, что работа «Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава» соответствует всем критериям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Марченко Екатерина Игоревна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 - «минералогия, кристаллография».

Отзыв составил:

Бобров Андрей Викторович – профессор кафедры петрологии геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, доцент, доктор геолого-минералогических наук; адрес: 119991 Москва, Ленинские горы, д. 1, МГУ; тел. +7(495)939-49-29; e-mail: archi@geol.msu.ru

Я, Бобров Андрей Викторович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой Диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

11.04.2019

