

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 Марченко Екатерины Игоревны посвящена актуальному вопросу изучение фазового и химического состава глубинных оболочек Земли с применением методов атомистического, квантово-химического моделирования и эволюционного предсказания кристаллических структур. Объект исследования сложен для экспериментального изучения ввиду труднодоступности мантийного вещества и экстремальности условий его нахождения, что, безусловно, выдвигает вперед расчётные подходы предсказания кристаллических веществ, позволяющие существенно дополнить имеющиеся данные о химическом и минеральном составе мантии Земли, получить детальные данные о структуре и свойствах соединений, предсказать их стабильность и условия существования.

В представленной работе рецензенту хотелось бы выделить два научных результата: (1) разработанная согласованная трансферабельная модель потенциалов межатомного взаимодействия фосфатов всех редкоземельных элементов, энергии образования их собственных дефектов, определенные параметры термодинамических функций, температуры распада твердых растворов, в частности, имеющие значения для понимания свойств природных минералов-геохронометров монацита и ксенотима; (2) рассчитанные коэффициенты перераспределения РЗЭ ряда La-Lu относительно перовскитов нижней мантии и заключение об избирательном характере вхождения легких и тяжелых РЗЭ в CaSiO_3 , MgSiO_3 . Исследования в этом направлении крайне актуальны не только для поиска мантийных резервуаров РЗЭ, но и для решения петрологической задачи диагностики условий кристаллизации Ca- и Mg-перовскитов (и других минералов) по характеру концентрационного распределения РЗЭ.

При чтении автореферата в попытках глубже понять результаты работы, рецензенту осталось не ясно: (1) какие именно данные были получены с применением квантовохимических расчетов и согласуются ли эти данные с результатами расчетов методом парных потенциалов; (2) рассматривался ли размерный фактор моделируемых соединений (соотношение фазовой границы и объема), и насколько он может быть значим в условиях нижней мантии? Сделанные незначительные замечания не портят общего хорошего впечатления от диссертационной работы, которая выглядит логически связанным и завершенным научным исследованием.

Диссертантом освоен широкий спектр современных подходов и методик расчёта кристаллических соединений, их грамотное совместное применение с опорой на экспериментальные данные, что, несомненно, позволило провести исследование на высоком уровне и достигнуть поставленных задач. Достаточное внимание уделено моделированию твердых растворов с изоморфными замещениями и собственными дефектами, с их неупорядоченным и упорядоченным размещением, что существенно приблизило модель кристаллических структур к реальным мантийным фазам. Все защищаемые положения обоснованы полученными данными. Данные исследований неоднократно докладывались на ведущих конференциях по тематике диссертации, хорошо представлены в публикациях автора диссертации, в том числе в трех опубликованных (и двух принятых в печать) в реферируемых представительных журналах.

Отзыв на автореферат диссертации **положительный**. Представленная работа по объему и уровню выполненных исследований, научной и практической значимости полученных результатов соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к

кандидатским диссертациям, а ее автор **Марченко Екатерина Игоревна**, безусловно, заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

Замятин Дмитрий Александрович

Старший научный сотрудник, руководитель группы электронно-зондового микроанализа и сканирующей электронной микроскопии лаборатории физических и химических методов исследования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института геологии и геохимии им. А.Н. Заварицкого Уральского Отделения Российской академии наук (ИГГ УрО РАН).

620016, Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского, 15

www.igg.uran.ru; +7(343) 2879030; e-mail: zamyatin@igg.uran.ru

Я, Замятин Дмитрий Александрович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

«22» апреля 2019 г.



(подпись)

М.П.

