

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертацию 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 – плод большого и многолетнего труда, который потребовался для решения важной фундаментальной задачи – уточнения химического состава фаз глубинных оболочек Земли, количественной оценки изоморфного поведения ряда примесных элементов в нижней мантии Земли, а также предсказания вероятных, ранее неизвестных кристаллических фаз нижней мантии с использованием современных эволюционных алгоритмов.

Актуальность работы Марченко Е.И. заключается в том, что полученные новые данные о кристаллических структурах и физических свойствах минеральных фаз переменного состава в широком диапазоне термодинамических условий могут быть использованы для уточнения моделей химического и фазового состава глубинных оболочек Земли. Разработанная при участии автора модель потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования твердых растворов монацитов и ксенотимов, содержащих редкоземельные элементы позволила провести анализ их количественного распределения в основных фазах мантии Земли. Отметим, что модель также пригодна для моделирования термодинамических характеристик и радиационной устойчивости фосфатных матриц переменного состава. Предложенные автором новые структуры в системе Са–Al–O позволили уточнить фазовую диаграмму для этой системы; проведенные расчеты выявили фазы-аккумуляторы Al и Са в нижней мантии Земли.

В работе Е.И. Марченко присутствует значительная доля научной новизны, о чем говорит солидный список публикаций автора. Оригинальные результаты, полученные Марченко Е.И., неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях. По материалам диссертации опубликовано (и принято в печать) 5 статей в реферируемых журналах Computational Material Science, Доклады РАН, Crystallography Reports и Вестник Московского университета, а также 26 статей в сборниках и тезисов конференций.

Полученные в диссертационной работе результаты и разработанные методики вошли в курсы «Компьютерное программное обеспечение в кристаллографии» и «Математическое

моделирование кристаллических структур», читаемых бакалаврам кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ при участии автора.

Результаты научной деятельности Е.И. Марченко были высоко оценены наградами: в 2016 году она стала первым лауреатом премии имени В.С.Урусова, а в 2017 году была удостоена медали РАН по итогам конкурса 2016 года в области геологии, геофизики, геохимии и горных наук за работу по тематике настоящей диссертации.

Также отметим и разносторонний интерес Екатерины Игоревны – не все ее публикации непосредственно относятся к тематике настоящей работы – ряд статей посвящено изучению других объектов, в частности моделированию важных для авиационной техники жаропрочных материалов – силицидов ниобия. По этой тематике у диссертанта опубликовано шесть статей в реферируемых научных журналах. Марченко Е.И. – соавтор учебного пособия «Отдельные главы структурной химии» (издательство Книжный дом Университета, Москва, ISBN 978-5-7913-1078-1, 268 стр., соавторы Еремин Н.Н. и Еремина Т.А.), которое отражает содержание одноименного курса, читаемого в филиале МГУ в Душанбе для студентов, обучающихся по направлению «Химия, физика и механика материалов».

Высокий уровень физико-математической подготовки, достигнутый Марченко Е.И. путем тематических научных стажировок в профильные исследовательские центры (Самара, Новосибирск, Киев, Франция) и посещением специализированных курсов по квантовохимическим расчетам (физический факультет МГУ), позволил ей провести все теоретические расчеты, представленные в диссертационной работе, на высоком методическом уровне.

Текст и автореферат диссертационной работы написаны диссертантом самостоятельно и оформлены в соответствии с требованиями, предъявляемыми положением о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова к кандидатским диссертациям.

Таким образом, с точки зрения научного руководителя диссертационная работа Е.И.Марченко может быть представлена к защите на диссертационном совете МГУ.04.02 по специальности 25.00.05 – «минералогия, кристаллография».

Научный руководитель, доктор химических наук,
заведующий кафедрой кристаллографии и
кристаллохимии геологического факультета МГУ
имени М.В.Ломоносова, профессор РАН

Еремин Н.Н.