

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 теоретическому изучению состава и кристаллических структур минеральных фаз в условиях мантии Земли методами атомистического и квантово-химического моделирования. Работа имеет междисциплинарный характер, её теоретическая и практическая значимость не вызывают сомнений. Поскольку проведение экспериментов в диапазоне давлений и температур мантии зачастую затруднительно, новые данные теоретических расчетов о перераспределении элементов в минеральных фазах глубинных геосфер, о кристаллических структурах и их физических свойствах могут быть использованы для уточнения химического и фазового состава глубинных оболочек Земли. Разработанная качественная модель потенциалов для твердых растворов со структурами монацита и ксенотима, содержащих редкоземельные элементы пригодна для моделирования радиационной устойчивости фосфатных матриц переменного состава, как контейнеров для высокоактивных радиоактивных отходов.

Автореферат диссертации производит хорошее впечатление. Личный вклад автора в проведенной работе сомнений не вызывает. Полученные результаты соответствуют поставленным задачам, обоснованы в достаточной степени и соответствуют имеющейся ограниченной экспериментальной информации по исследуемым объектам.

Тем не менее, при прочтении автореферата возник ряд вопросов и замечаний:

1. Каким образом выбирались конфигурации при расчете энтальпии смещения монацитов? Чем обоснован их выбор из всего конфигурационного пространства?

2. Каким образом осуществлялся выбор размеров сверхъячеек для исследуемых объектов? К сожалению, в работе это не описано, возможно, автор полагает, что эти методики общеизвестны.

3. Чем обусловлено отсутствие парного потенциала Рm-О в таблице 1 с разработанной моделью потенциалов лантаноид-кислород?

Сделанные замечания не умаляют достоинства диссертационной работы по материалам которой Марченко Е.И. опубликованы 5 статей в научных журналах, а также 32 тезиса докладов на Российских и международных конференциях.

Диссертационная работа Марченко Екатерины Игоревны «Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава» отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а также оформлена, согласно положениям №5, 6 «Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова».

Нет сомнений, что Марченко Екатерина Игоревна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

____ / Тарасов А.Б.

05.04.2019

Я, Тарасов Алексей Борисович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Место работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», факультет наук о материалах, лаборатория новых материалов для солнечной энергетики, заведующий лабораторией.

Адрес места работы: 119991, Россия, Москва, Ломоносовский просп., д. 27, корп. 1.

E-mail: alexey.bor.tarasov@yandex.ru

Должность: заведующий лабораторией

Ученая степень: кандидат химических наук.

Подпись Тарасова А.Б.

ЗС

Тарасов А.Б.