

ОТЗЫВ

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

Работа Марченко Е.И. посвящена атомистическому моделированию кристаллического строения минеральных фаз глубинных оболочек Земли и предсказанию ранее не известных кристаллических структур минеральных фаз, которые могут существовать в мантии с использованием эволюционного алгоритма USPEX. Автором проведена оценка возможности аккумуляции редкоземельных элементов в $MgSiO_3$ и $CaSiO_3$, исследованы механизмы упорядочения железа в твердом растворе скиагит - Фермайджорит, выполнена оценка изоморфной емкости по калию в перовскитоподобных структурах при повышенных температурах и давлений, сделано предсказание о возможности формирования $CaAl_2O_4$ в нижней мантии Земли с марокитоподобными туннельными структурами с каналами небольших размеров.

Особо стоит отметить разработку автором согласованного набора частично ионных потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования фосфатов всех редкоземельных элементов, а также иттрия и плутония. Особый интерес вызывают проведенные здесь исследования с применением эволюционного алгоритма, однако вызывает некоторое сожаление, что автор не предпринял попытки экспериментально получить предсказанные им фазы.

Автореферат диссертации написан ясным хорошим языком. Материалы диссертации опубликованы в 3 статьях (еще 2 статьи приняты в печать), рекомендованных ВАК, и представлены на многочисленных конференциях различного уровня. Автореферат соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, автореферат соответствует критериям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждении постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г.), и его автор Марченко Екатерина Игоревна заслуживает

присвоения степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05
– минералогия, кристаллография.

18 апреля 2019 г.

Бубнова Римма Сергеевна,
Доктор химических наук,
специальность 02.00.04 – физическая химия,
Заведующая лабораторией структурной химии
Федеральное государственное бюджетное учр
Ордена Трудового Красного Знамени Институт
им.И.В. Гребенщикова Российской академии наук
199034, г. Санкт-Петербург, наб. Макарова, д. 1
Тел. +7(812)328-07-02, e-mail: rimma_bubnova@phc.ras.ru

Я, Бубнова Римма Сергеевна, даю согласие на включение своих
персональных данных в документы, связанные с работой
диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Волков Сергей Николаевич,
Кандидат химических наук,
специальность 02.00.04 – физическая химия
Старший научный сотрудник лаборатории
Федеральное государственное бюджетное учреждение
Ордена Трудового Красного Знамени Института
им.И.В. Гребенщикова Российской академии наук
199034, г. Санкт-Петербург, наб. Макарова, д. 1
Тел. +7(812)328-07-02, e-mail: s.n.volkov@phc.ras.ru

Я, Волков Сергей Николаевич, даю согласие на включение своих
персональных данных в документы, связанные с работой
диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись
удостоверен

О.В. Круглова

