

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.

Диссертационная работа Марченко Е.И. посвящена поиску потенциально новых фаз, которые могут кристаллизоваться в условиях мантии Земли, а также оценить возможные вариации химического состава в них. Теоретические расчеты выполнены методами атомистического и квантово-химического моделирования. Поскольку *in situ* исследования минералов и материалов при высоких температурах и давлениях крайне трудоемки в силу особенностей проведения данных экспериментов, теоретические предсказания представляют собой наиболее оптимальный способ изучения возможного фазового разнообразия глубинных геосфер Земли.

Результаты работы в целом не вызывают сомнений, тем не менее есть несколько комментариев и вопросов:

- В выводе 1 сказано, что «разработан согласованный набор частично ионных потенциалов взаимодействия для моделирования фосфатов **всех** редкоземельных элементов, а также иттрия и плутония», но в табл. 1 отсутствуют данные для скандия и прометия. Кроме того, согласно номенклатуре ИЮПАК скандий, иттрий и лантаноиды все вместе объединяются в группу редкоземельных элементов.

- В разделе 3.1 приведена теоретическая оценка характера распределения редкоземельных элементов в нижнемантийных перовскитах состава MgSiO_3 и CaSiO_3 , а также магнезиовюстите. На рис. 3. показана зависимость энтальпии смешения от состава твердых растворов MgSiO_3 и CaSiO_3 с гипотетическими REE-миналами. К сожалению, в разделе нет никакой информации об этих «REE-миналах» и характере гетеровалентного изоморфизма $\text{Ca}^{2+}(\text{Mg}^{2+}) \leftrightarrow \text{REE}^{3+}$ в условиях нижней мантии с сохранением структуры перовскита.

- В разделе 3.2 рассмотрены различные схемы упорядочения Fe и Si по октаэдрическим позициям в структуре Fe-*maj*. Какая симметрия этих высокоупорядоченных структур?

- На рис. 8 и 11 представлены известные и гипотетические структуры состава CaAl_2O_4 . Некоторые структуры характеризуются наличием «висячих» вершин у AlO_6 -октаэдров. Какая сумма валентных усилий на таких вершинах? Не могут ли они быть частично протонированы, а данные фазы быть резервуаром для воды в условиях мантии?

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.

Расцветаева Р.К.*
22.04.2019



Я, Расцветаева Рамиза Кераровна, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.

Подпись Р.К. Расцветаевой заверяю:
Ученый секретарь
ФНИЦ "Кристаллография и фотоника"
кандидат физико-математических наук



Задина Л.А.

*Расцветаева Рамиза Кераровна, доктор геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05-минералогия, кристаллография, главный научный сотрудник лаборатории рентгеновских методов анализа и синхротронного излучения Института кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. 119333, г. Москва, Ленинский проспект, д. 59. тел.: 8-499-135-34-00; e-mail: rast.crys@gmail.com