

**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.**

Диссертация Марченко Е.И. посвящена исследованиям в области теоретической кристаллохимии и минералогии и затрагивает актуальные проблемы минерального и химического строения внутренних оболочек Земли. При большом интересе, направленном на изучение строения, условий образования, взаимных превращений и условий сосуществования глубинных минеральных фаз, а также при значительных материальных и технических усилиях, прикладываемых к решению этих задач, объем экспериментальных данных невелик и уменьшается с увеличением глубины проникновения в тело планеты. Поэтому работы теоретического плана, базирующиеся на математических моделях строения вещества, всегда будут востребованы как опережающий инструмент исследований.

Автореферат Е.И. Марченко дает полное представление о проделанной работе:

анализ опубликованных научных материалов по теме диссертации;
подбор и «обкатка» на изученных объектах потенциалов взаимодействий для достижения максимально близкого согласования расчетных параметров с их уже известными экспериментальными значениями с целью верификации параметров потенциалов;
расчет структурно-химических и термодинамических свойств гипотетических минеральных фаз глубинных горизонтов.

Большой объем выполненной работы подтверждается числом опубликованных научных работ из 32 наименований, в авторский коллектив которых входит Е.И. Марченко, а также списком основных результатов работы из 8 пунктов.

Положения, вынесенные автором в раздел «Новизна работы» отражают заметный вклад автора в развитие математических методов теоретической кристаллохимии.

В качестве незначительного редакционного замечания следует отметить неудачное представление рисунков № 2, 9, 10-б – слишком мелкие надписи в поле рисунков затрудняют их восприятие. Кроме того, хочется высказать сожаление о том, что за пределами автореферата осталось хотя бы упоминание о возможном варианте объяснения результата, сформулированного в пункте 6 «Основных результатов работы», а именно, почему при энергетической выгоде вхождения Na по сравнению K в перовскитовую структуру изоморфная емкость этой структуры по отношению к K оказывается большей, чем по отношению к Na?

В целом автореферат отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова. Судя

по содержанию автореферата, диссертационная работа Е.И. Марченко соответствует паспорту специальности 25.00.05 – « Минералогия, кристаллография» (по химическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова.

Соискатель Марченко Екатерина Игоревна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 – «Минералогия, кристаллография».



Вигасина М.Ф.
18.04.2019 г.

Я, Вигасина Марина Федоровна, 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», геологический факультет, кафедра минералогии.

Адрес места жительства: 123181, Москва, Неманский проезд, дом 1, корпус 1, кв. 428.

E-mail: vigasina@geol.msu.ru

Должность: ведущий научный сотрудник

Ученая степень: кандидат геолого-минералогических наук



По,
Зав