

Отзыв

на автореферат диссертации Е.И. Марченко

« АТОМИСТИЧЕСКОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МАНТИЙНЫХ ФАЗ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 25.00.05 (минералогия, кристаллография)

Судя по автореферату, диссертационная работа Марченко Екатерины Игоревны, посвященная теоретическим расчетам, как кристаллических структур, так и физических свойств для группы так называемых мантийных фаз, представляет собой значительный вклад в весьма перспективное и активно развивающееся в настоящее время направление квантово-химического моделирования. Автором поставлены разнообразные задачи от моделирования свойств и расчета пределов изоморфных вхождений до создания моделей гипотетически возможных структур в условиях высоких давлений. Задачи выполнены, и результаты представлены на высоком профессиональном уровне. Автореферат вызывает положительное впечатление, но есть несколько замечаний:

1. Основное «традиционное» замечание, которое, по-видимому, всегда возникает при виде работы, посвященной моделированию. Хотелось бы видеть больше сопоставления теории и эксперимента. Рис. 3, 4, 5 демонстрируют расчетные данные, при этом автор в тексте указывает, что они хорошо согласуются с экспериментом. Насколько хорошо? Понятно, что экспериментальных данных немного, но даже 2-3 точки могли бы наглядно продемонстрировать это согласование.
2. Автор моделирует гипотетические структуры CaAl_2O_4 при высоких (50-100 ГПа) давлениях. Хочется пожелать провести также экспериментальные исследования данного соединения при высоких P,T условиях и подтвердить реалистичность данных моделей. И может быть, целесообразно в следующий раз выбрать для моделирования структуры объекты, которые проще проверить в плане эксперимента.
3. В автореферате достаточно много опечаток

Все высказанные замечания ни в кой мере не умаляют заслуг автора. Судя по автореферату и приведенному списку публикаций (в списке есть 5 статей, индексируемых наукометрическими базами, и около трех десятков! сообщений в сборниках и тезисов докладов), диссертация Марченко Е.И. является цельным научным исследованием, представляющим значительный интерес для широкого круга ученых, работающих в области естественных наук и для кристаллографии в частности.

Диссертация Марченко Екатерины Игоревны «АТОМИСТИЧЕСКОЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР И ФИЗИЧЕСКИХ

СВОЙСТВ МАНТИЙНЫХ ФАЗ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА» соответствует специальности 25.00.05 «минералогия, кристаллография» и требованиям Положения о порядке присуждения научным работникам ученых степеней и присуждения научным сотрудникам ученых званий.

Диссертация, автореферат и опубликованные в широкой печати данные, безусловно, свидетельствуют о том, что ее автор является сложившимся исследователем и заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук:

22.04.2019

Кржижановская Мария Георгиевна

199034, Университетская наб. 7/9, тел. +7 812 3636914, e-mail: mariya.krzhizhanovskaya@spbu.ru

Доцент кафедры кристаллографии Института наук о Земле Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет" (СПбГУ)

Кандидат геолого-минералогических наук (специальность 25.00.05 «минералогия, кристаллография»)

Я, Кржижановская Мария Георгиевна, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку»

Филатов Станислав Константинович

199034, Университетская наб. 7/9, тел. +7 911 3636914, e-mail: filatov.stanislav@gmail.com

Профессор кафедры кристаллографии Института наук о Земле Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет" (СПбГУ)

Доктор геолого-минералогических наук (специальность 25.00.05 «минералогия, кристаллография»)

Я, Филатов Станислав Константинович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку»