

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 Е.И. Марченко посвящена атомистическому и квантовохимическому моделированию структур некоторых главных фаз - составляющих переходной зоны и нижней мантии Земли, содержащих разнообразные примесные компоненты. Работа выполнена на основе большого объема расчетных данных с использованием современных методов моделирования кристаллических структур на основе полуэмпирических межатомных потенциалов и в рамках теории функционала плотности. Актуальность этой работы не вызывает сомнения, поскольку проведенные исследования позволяют выявить и прогнозировать геохимические особенности фаз нижней мантии и переходной зоны. Полученные результаты дают важное основание для экспериментальных исследований распределения примесных компонентов, таких как щелочи, Cr, Al, РЗЭ, между фазами нижней мантии и переходной зоны. Некоторые из этих компонентов (например, Al, Cr в перовскитовых фазах), несмотря на невысокие концентрации, способны влиять на физические свойства мантийных минералов, определяя геофизические неоднородности в мантии. Результаты, представленные в диссертации, интересны для специалистов в областях кристаллографии и кристаллохимии, экспериментальной минералогии, петрологии, геохимии и минералогии. По ходу чтения автореферата у меня возникли следующие вопросы.

1. Термодинамические свойства твердых растворов CaSiO_3 и MgSiO_3 перовскитов, вмещающих РЗЭ, рассчитывались с помощью неких гипотетических РЗЭ-миналов, состав которых в автореферате не приведен. Учитывая валентность РЗЭ (3+), это должны быть соединения типа $\text{REE}_2(\text{SiO}_3)_3$. Изоструктурны ли эти соединения перовскиту? Или автор использовала какие-то иные миналы?
2. На рис. 3 автор указывает область «допустимых» составов до 10 мол. % РЗЭ в перовскитах. Почему эти концентрации являются допустимыми, если концентрации РЗЭ даже в обычных породообразующих минералах редко превышает уровня ppm?
3. Не понятен вывод о том, что, несмотря на энергетически более выгодное вхождение Na в структуры перовскитов, изоморфная емкость этих структур по калию выше.

Результаты работы Е. И. Марченко изложены в 5 статьях, опубликованных и принятых к печати в изданиях, рекомендованных ВАК РФ, а также в тезисах совещаний различного уровня. Автореферат диссертации отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом им. М.В. Ломоносова. Диссертация «Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава» соответствует паспорту специальности 25.00.05 «минералогия кристаллография» (по химическим наукам) и критериям, определенным в пунктах 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова. Автор диссертации, Марченко Екатерина Игоревна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по указанной специальности.

Сафонов Олег Геннадьевич

Директор ИЭМ РАН, доктор геолого-минералогических наук, профессор РАН.

Федеральное бюджетное государственное учреждение науки Институт экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского РАН (ИЭМ РАН), 142432, Московская обл., г. Черноголовка, ул. Академика Осипяна, д. 4. e-mail: oleg@iem.ac.ru, тел.: +7(496)5244425

Я, Сафонов Олег Геннадьевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

«24» апреля 2019 г.