

Заключения диссертационного совета МГУ 04.02

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

Решение диссертационного совета от 26 апреля 2019 г., протокол №15

О присуждении Марченко Екатерине Игоревне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Атомистическое и квантово-химическое моделирование кристаллических структур и физических свойств мантийных фаз переменного состава» по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография принята к защите диссертационным советом МГУ 04.02, протокол №09 от 21.03.2019 г.

Соискатель Марченко Екатерина Игоревна, 1994 г. рождения, в 2017 году окончила магистратуру Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. В настоящий момент является аспирантом 2-го года обучения очной аспирантуры геологического факультета.

Соискатель Е. И. Марченко с 2017 года работает инженером I категории в отделе защиты информации геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Диссертация выполнена на кафедре кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научные руководитель: доктор химических наук, профессор РАН Еремин Николай Николаевич, заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

1. Блатов Владислав Анатольевич, доктор химических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Самарский государственный технический университет», директор Международного научно-исследовательского центра по теоретическому материаловедению;

2. Кусков Олег Львович, доктор химических наук, профессор, член-корреспондент РАН. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Ленина и Ордена Октябрьской Революции Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского Российской академии наук (ГЕОХИ РАН), лаборатория термодинамики и математического моделирования природных процессов, главный научный сотрудник;

3. Мохов Андрей Владимирович, доктор геолого-минералогических наук. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии Российской академии наук (ИГЕМ РАН), лаборатория кристаллохимии минералов имени академика Н.В. Белова, заведующий лабораторией;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 27 опубликованных работ по теме диссертации, в том числе 5 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография:

1. *Eremin N.N., Marchenko E.I., Petrov V.G., Mitrofanov A.A., Ulanova A.S.* Solid solutions of monazites and xenotimes of lanthanides and plutonium: Atomistic model of crystal structures, point defects and mixing properties // Computational Material Science. Elsevier BV (Netherlands). 2019. V. 157. Pp. 43-50. DOI: [10.1016/j.commatsci.2018.10.025](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.10.025) (IF 2.53)
2. *Марченко Е.И., Еремин Н.Н., Бычков А.Ю., Гречановский А.Е.* Са- и Mg-перовскитовые фазы мантии Земли как возможный резервуар Al по данным компьютерного моделирования // Вестник Московского

- университета. Серия 4: Геология. Изд-во Моск. ун-та (М.). 2017. № 4. С. 3-7. (DOI: [10.3103/S0145875217050076](https://doi.org/10.3103/S0145875217050076) – переводная версия)
3. Eremin N.N., Grechanovsky A.E., Marchenko E.I. Atomistic and ab-initio modeling of CaAl_2O_4 high-pressure polymorphs under Earth's mantle conditions // Crystallography Reports. Maik Nauka/Interperiodica Publishing (Russian Federation). 2016. V. 61. №3. Pp. 432-442. (IF 0.762)
 4. Еремин Н.Н., Бобров А.В., Марченко Е.И. Оценка вхождения примесных ионов К и Na в кристаллические структуры CaSiO_3 и MgSiO_3 при давлениях 18-25 ГПа // Доклады Академии наук. 2019. (IF 0.58) (принято в печать)
 5. Марченко Е.И., Бобров А.В., Еремин Н.Н. Оценка механизмов вхождения примеси хрома в CaSiO_3 и MgSiO_3 фазы нижней мантии Земли // Доклады Академии наук. 2019. (IF 0.58) (принято в печать)

Выбор официальных оппонентов обоснован их высокой компетентностью и значительным опытом работы в области теоретического моделирования, кристаллохимического анализа, термодинамических расчетов и исследования минерального вещества Земли и других объектов Солнечной системы при различных P - T параметрах, а также наличием публикаций в научных изданиях в сфере исследования соискателя, что позволяет определить значимость диссертации.

На диссертацию и автореферат дополнительно поступило 11 отзывов, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в ней разработана трансферабельная модель потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования вхождения редкоземельных элементов (РЗЭ) и плутония в структуры безводных фосфатов. Модель была опробована для оценки свойств смешения твердых растворов со структурами монацита, ксенотима и рабдофана, как возможных

матриц для захоронения высокоактивных радиоактивных отходов. Показано, что разработанная модель обладает лучшими предсказательными возможностями, чем все опубликованные в литературе модели. Модель была дополнена парными потенциалами для алюминия, хрома, натрия, калия для моделирования вхождения этих элементов в качестве примеси в фазы нижней мантии Земли. Теоретически оценены изоморфные емкости предполагаемых главных нижнемантийных минеральных фаз по ряду примесных элементов. Для твердого раствора скиагит – Fe-мэйджорит методами теоретического моделирования в сверхъядейках впервые показано влияние степени упорядочения катионов на характеристики твердого раствора, что позволило объяснить нелинейные зависимости метрических характеристик этих твердых растворов, наблюдаемые экспериментально. С помощью эволюционного алгоритма USPEX показана возможность существования минеральных фаз с новыми кристаллическими структурами в системе Ca–Al–O, уточнена фазовая диаграмма CaAl_2O_4 при термодинамических условиях мантии Земли.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в уточнение химического состава минеральных фаз глубинных оболочек Земли, в расчет количественного распределения примесных элементов в них методами атомистического и квантово-химического моделирования и предсказание вероятных, ранее неизвестных кристаллических структур минеральных фаз, которые могут существовать в мантии Земли:

1. Разработанная термодинамически достоверная трансферабельная модель межатомных потенциалов продемонстрировала, что тяжелые лантаноиды Er, Tm, Yb и Lu аккумулируются преимущественно в MgSiO_3 , а более легкие лантаноиды – в CaSiO_3 . При повышении

давления изоморфная емкость этих фаз по редкоземельным элементам понижается.

2. Степень и механизмы упорядочения железа по катионным позициям в твердом растворе скиагит – Fe-мэйджорит сильно влияют на его локальную структуру, механические свойства и кристаллографические характеристики.
3. В диапазоне давлений 18-25 ГПа и температур 1873-2223 К изоморфная ёмкость перовскитоподобных структур по калию существенно выше, чем по натрию, и может достигать значений 10^{-5} мол. %.
4. В диапазоне давлений 18-25 ГПа и температур 1873-2223 К изоморфная емкость перовскитоподобных MgSiO_3 и CaSiO_3 по хрому остается стабильной и составляет ~ 1 мол. % для MgSiO_3 и ~ 0.7 мол. % для CaSiO_3 .
5. Количество примесного алюминия, аккумулируемое главными минеральными фазами нижней мантии несколько меньше его количества, оцениваемого по различным моделям химического состава глубинных оболочек Земли. Кристаллические структуры собственных фаз Al в нижней мантии Земли могут быть представлены соединениями с марокитоподобными туннельными структурами с каналами небольших размеров.

На заседании 26 апреля 2019 г. диссертационный совет принял решение присвоить Марченко Екатерине Игоревне ученую степень кандидата химических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

При проведении тайного голосования члены диссертационного совета в количестве 22 человек, из них 12 докторов наук по специальности 25.00.05 –

минералогия, кристаллография, из них 6 докторов химических наук,
проголосовали:

«за» – 22,

«против» – 0 ,

недействительных бюллетеней – 0

Председатель совета, доктор геол.-мин.
наук, член-корр. РАН, профессор

И.В. Пеков

Ученый секретарь совета, доктор
химических наук, профессор

Е.Л. Белоконева

26.04.2019

