

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации

Гаврюшкина Павла Николаевича «Кристаллохимия карбонатов при экстремальных давлениях и температурах», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 1.6.4 – Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Высокая актуальность темы работы обусловлена тем, что фазовые превращения, происходящие с карбонатами в области высоких давлений и температур, являются определяющим фактором геологических преобразований в ходе их субдукционного погружения. Однако, до исследования, проведенного диссертантом, не были известны общие и частные закономерности структурных трансформаций щелочно-земельных карбонатов, SrCO_3 , BaCO_3 , и щелочных карбонатов, Li_2CO_3 , Na_2CO_3 , K_2CO_3 , некоторые из которых встречаются в виде самостоятельных минералов. Решение этой проблемы в рамках рассматриваемой работы основано на квантово-химическом моделировании кристаллических структур, расчёте энергии Гиббса и построение фазовых P-T диаграмм карбонатов, экспериментальном подтверждении результатов прогнозирования и сравнительном кристаллохимическом анализе подобия структур.

Предложено использовать эволюционные алгоритмы генерации структур с их последующей квантовохимической оптимизацией для MgCO_3 , CaCO_3 , SrCO_3 , BaCO_3 , FeCO_3 , PbCO_3 , Li_2CO_3 , Na_2CO_3 , K_2CO_3 в интервале давлений от 0 до 200 ГПа. Обоснованы зависимости энергии Гиббса от температуры для предсказанных фаз в интервале от 0 до 2500 К. Аналогичный элегантный подход использован для промежуточных соединений в системах MO-CO_2 ($\text{M} = \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) и $\text{M}'_2\text{O-CO}_2$ ($\text{M}' = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}$). Исследование подкреплено поиском аналогов обнаруженных структур в базе данных неорганических соединений. Теоретические аспекты работы

подкреплены экспериментами под высоким давлением, рентгеноструктурным анализом и просвечивающей электронной микроскопией полученных кристаллических фаз. В результате удалось теоретически и экспериментально обосновать существование более 25 новых фаз карбонатов, ортокарбонатов, оксиортокарбонатов, пирокарбонатов. Установлены пути их взаимных структурных переходов и изоструктурные аналоги среди силикатов.

В качестве замечания следует отметить, что в работе используется понятие топологического подобия, но не поясняется, что конкретно подразумевается под этим термином. Как топологическое подобие соотносится с понятиями структурный тип, кристаллическая решетка и подрешетка? Какой физический и химический смысл имеет топологическое подобие кристаллических структур?

Данное замечание не влияет на положительную оценку работы. Все научные положения, представленные в диссертационной работе, обоснованы, и сделанные выводы аргументированы. По результатам исследований Гаврюшкиным П.Н. опубликовано 30 статей в ведущих рецензируемых научных изданиях, специализирующихся на публикации исследований в областях минералогии, кристаллографии, геохимия, материаловедения, физической химии, неорганической химии. Это свидетельствует о том, что Гаврюшкин Павел Николаевич признанный научным сообществом большой специалист в области геохимии, кристаллохимии минералов и неорганических соединений. Диссертация «Кристаллохимия карбонатов при экстремальных давлениях и температурах» под его авторством выполнена на высоком уровне как завершенная научно-квалификационная работа. Диссертационная работа полностью соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (с изменениями и дополнениями). Представленная работа соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней в МГУ имени М.В. Ломоносова,

предъявляемым к работам на соискание степени доктора химических наук. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.6.4 – Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых, а ее автор, Гаврюшкин Павел Николаевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук.

Я, Александров Евгений Викторович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Заведующий лабораторией

молекулярного моделирования

Центра НТИ «Цифровое

материаловедение: новые

материалы и вещества» МГТУ им.

Н.Э. Баумана, доктор химических

наук (1.4.4 – Физическая химия)

Александров

Евгений

Викторович

Полное название организации: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)».

Почтовый адрес: 105005, г. Москва, вн. тер. г. муниципальный округ Басманный, ул. 2-я Бауманская, д. 5, с. 1, <https://bmstu.ru/>

Телефон: +7 (499) 263 63 91, +79178126387

Факс: +7 (499) 267 48 44

Электронная почта: bauman@bmstu.ru, aleksandrov@bmstu.ru, aleksandrov_ev1@mail.ru.

Дата составления: 15.10.2024

