

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертации Замятина Дмитрия Александровича «Кристаллохимия и спектроскопия циркона в решении вопросов его микронзондового химического U-Th-Pb-датирования», представленную на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 - минералогия, кристаллография.

Циркон $ZrSiO_4$ – исключительно важный минерал - геохронометр. Методические работы в области химического датирования циркона, изучение его авторадационных повреждений всегда представляют несомненный интерес для минералогии и геохимии. В рецензируемой работе представлены результаты комплексного исследования природных цирконов, как разнообразными экспериментальными методами, так и теоретическими расчетными подходами. Научная новизна диссертации заключается в разработке и внедрении методики совместного анализа изображений, полученных в обратно-рассеянных электронах и катодолюминесценцией. Автор разработал методику определения концентраций различных элементов в цирконе, учитывающую деградацию материала в точке воздействия пучка электронов. Получены новые теоретические данные о свойствах смещения и локальной структуре твердого раствора циркон-коффинит.

Замечания по автореферату логично разделить на две группы: принципиальные замечания по существу и замечания по оформлению автореферата.

Замечания по существу работы

1. Автор не приводит модель потенциалов межатомного взаимодействия для моделирования твердого раствора циркон-коффинит. Читателю остается только догадываться о типах потенциалов межатомного взаимодействия и зарядовой модели, используемой автором.

2. Циркон неоднократно подвергался теоретическому структурному моделированию с помощью различных потенциалов межатомного взаимодействия, причем, как статическими молекулярно-механическими расчетами, так и молекулярно-динамическими. Из текста автореферата непонятно, почему автор

использовал оригинальную собственную модель потенциалов. В чем ее преимущество над альтернативными моделями?

3. Непонятно, что автор вкладывает в термин «пороговая энергии я смещения атомов» (стр. 12). По смыслу используемого термина может возникнуть ощущение, что это энергия, требуемая на сдвиг атома из положения равновесия на определенное фиксированное расстояние. Рецензенту кажется, что в данном случае речь идет об энергиях образования вакансий атомов различного сорта. Аналогичный вопрос вызывает термин «средние структурные параметры ближнего порядка».

4. Автор утверждает, что параметры элементарных ячеек и длины связей катион-кислород меняются не аддитивно, хотя рисунок 6 позволяет говорить как раз о линейной зависимости.

Замечания по оформлению работы

1. Автор утверждает, что моделирование твердых растворов циркон-коффинит осуществлялось по программам GULP и BINAR (стр. 12). Это не совсем так, поскольку программа BINAR не является программным продуктом для моделирования твердых растворов, а лишь определенным служебным пакетом, предназначенным для формирования неупорядоченных конфигураций. Очевидно, что само структурное моделирование осуществлялось исключительно по программе GULP.

2. Рисунок 5 автореферата неинформативен и вызывает вопросы. Рисунки 5а («бездефектный циркон»), 5б («двойные вакансии кислорода и циркония») и 5в («дивакансии кислорода») содержат одинаковые количества атомов кислорода. Очевидно, следовало бы показать позиции «двойных вакансий кислорода» на чертеже.

Приведенные незначительные замечания не умаляют общего положительного впечатления о работе. Несмотря на указанные недостатки, можно сделать вывод, что диссертация Замятина Д.А. является вполне законченным самостоятельным научным исследованием. В работе Замятина Д.А. присутствует значительная доля научной новизны, подтвержденной представленными в списке

литературы публикациями автора, в том числе 5 статьями в журналах из перечня периодических изданий, рекомендуемого ВАК и индексируемых в WoS, Scopus и РИНЦ.

Диссертация полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, Замятин Дмитрий Александрович, заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 – минералогия, кристаллография.

Рецензент – доктор химических наук,
заведующий кафедрой кристаллографии и
кристаллохимии геологического
факультета МГУ имени М.В.Ломоносова,
профессор РАН



Еремин Николай
Николаевич

22 сентября 2017 г.



Данные о рецензенте:

Доктор химических наук (2009) по специальности 25.00.05 - Минералогия, кристаллография. Заведующий кафедрой кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ.

Контактные данные: 119992, Москва, Ленинские горы 1А, Геологический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, офис 437.

e-mail: neremin@geol.msu.ru

neremin@mail.ru

Я, Еремин Николай Николаевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой объединенного диссертационного совета Д 999.081.03 и их дальнейшую обработку.