

УТВЕРЖДАЮ:



Директор ГЕОХИ РАН
д.х.н., чл.-корр. РАН

Р.Х. Хамизов

« 9 » апреля 2024 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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) о диссертации **Георгия Сергеевича НИКОЛАЕВА** «ОКСИ-, БАРО-, ТЕРМОМЕТРИЯ ШПИНЕЛИДОВ: Модель SPINMELT-2.0 и методики её применения», представленной на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 1.6.4 - минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Диссертация «ОКСИ-, БАРО-, ТЕРМОМЕТРИЯ ШПИНЕЛИДОВ: Модель SPINMELT-2.0 и методики её применения» подготовлена Г.С Николаевым в процессе работы в должности научного сотрудника лаборатории термодинамики и математического моделирования природных процессов ГЕОХИ РАН. В 1987 году соискатель окончил Геологический факультет Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова по специальности Геохимия. В 1993-1996 гг соискатель состоял в очной аспирантуре ГЕОХИ РАН. Кандидатские экзамены сданы.

Научный руководитель: доктор геолого-минералогических наук Арискин Алексей Алексеевич, профессор кафедры петрологии и вулканологии Геологического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», ведущий научный сотрудник ГЕОХИ РАН.

По результатам рассмотрения вышеозначенной диссертации принято следующее заключение.

Актуальность темы исследования. Рудные концентрации хромшпинелидов являются единственным источником хрома для промышленности. Кроме того, шпинелид самый распространенный акцессорный минерал ультраосновных-основных пород, который характеризуется разнообразными схемами изоморфного замещения катионов. Идея, что шпинелид потенциально может являться чувствительным индикатором петролого-геохимических процессов, впервые была высказана Томасом Нилом Ирвайном в 1965 году, и без малого 60 лет занимает умы петрологов и геохимиков. За прошедшие десятилетия это направление прошло путь от попыток вывода простых эмпирических зависимостей отдельных параметров состава шпинелида от интенсивных факторов [Maurel, Maurel, 1982, 1984; Murck, Campbell, 1986] до сложных термодинамических моделей, связывающих активности компонентов шпинелида с температурой и составом сосуществующих фаз [Sack, 1982; Sack, Ghiorso, 1991; Ariskin, Nikolaev, 1996; Pustovetov, Roeder, 2001]. В XXI в. выполнено много новых экспериментов, что позволило ставить задачу по перекалибровке модели SPINMELT [Ariskin, Nikolaev, 1996] на более широкий спектр составов расплава с учетом барического эффекта

Конкретное личное участие соискателя. Все представленные материалы, касающиеся анализа, обработки и обобщения использованной в работе петролого-геохимической информации, являются продуктом научной деятельности соискателя. В частности, им лично разработаны: оливин-шпинелевый оксибарометр для широкого спектра базальтовых систем, новая калибровка модели равновесия шпинелид-расплав, на базе которой им создана консольная фортран-программа для расчета одного равновесия, разработаны методики использования модели для решения петролого-геохимических задач связанных с равновесием шпинелид-расплав.

Степень достоверности результатов исследований. Достоверность полученных результатов определяется результатами тестирования и верификации модели.

Научная новизна. По сравнению с предшествующими ЭВМ-моделями кристаллизации шпинелида в базальтовых системах (1995-2002 гг.), SPINMELT-2.0 интегрирует новые экспериментальные данные, появившиеся в XXI в. Уникальной особенностью модели является учет влияния воды на кристаллизацию шпинелида.

Впервые проведено систематическое моделирование влияния широкого спектра параметров базальтовой системы (давление, окислительный потенциал, содержания петрогенных компонентов, хрома и воды) на топологию ликвидуса шпинелида.

Предложен новый эмпирический *Ol-Sp* оксигармометр для широкого спектра базальтовых систем (метеоритные, земные и лунные) в широких интервалах давления (0.001-25 кбар) и окислительно-восстановительных условий (IW-3 ÷ NNO+1). Полученное регрессионное уравнение имеет точность ~0.5 лог.ед., а его использование позволяет избежать систематических погрешностей при оценках окислительного потенциала в восстановительных условиях. Важно, что новый оксигармометр является *Ol-Sp* и не требует наличия *OPx* в равновесной ассоциации.

Практическая значимость работы. SPINMELT-2.0 – алгоритм моделирования ликвидусных температуры и состава шпинелида в водосодержащих мафических системах нормальной щелочности при давлении до 15 кбар и широком диапазоне окислительных условий (QFM-3 ÷ QFM+2). Разработанная ЭВМ-модель представляет мощный петролого-геохимический инструмент для реконструкции характеристик кристаллизации шпинелида. Эта задача находит решение как результат комбинирования расчетов при помощи программы SPINMELT-2.0 с независимыми данными о составах исходных магм и условий их кристаллизации.

Возможность исследования модельной топологии конкретного природного расплава позволяет не только эффективно проверять, как согласуются имеющиеся независимые оценки его петролого-геохимических параметров, но и осознанно корректировать его состав, что очень продуктивно при реконструкции исходных магм.

Новый эмпирический *Ol-Sp* оксигармометр за счет широкой калибровочной выборки может с успехом применяться как для широкого спектра природных объектов, так и для оценки окислительного потенциала экспериментальных систем. Он свободен от систематических погрешностей при оценках ΔQFM в восстановительных условиях и может быть приложен к системам не насыщенным по ортопироксену.

В пределах калибровочной выборки по точности она превосходит предшествующие аналоги. Актуальная версия модели SPINMELT-2 положена в основу нового поколения программ семейства SOMAGMAT-5 с возможностью моделирования эффектов кристаллизации сульфидно-шпинелевых котектик (Арискин и др., 2023).

Научная специальность, которой соответствует диссертация. По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертация соответствует паспорту специальности научных работников 1.6.4. – Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем ученой степени. Все основные научные выводы, которые находятся в основе защищаемых положений, отражены в материалах опубликованных автором статей и научных тезисов докладов. По теме диссертации автором опубликовано 20 печатных работ, в том числе 5 статей опубликованы в ведущих профильных журналах («Геохимия» и «Петрология»), входящих в перечень ВАК РФ (K1) и индексируемых индексируемых базами Scopus и Web of Science.

Основные научные результаты диссертации достаточно полно отражены:

1. Николаев Г.С., Арискин А.А., Бармина Г.С., Назаров М.А., Альмеев Р.Р. (2016) Тестирование *Ol-OPx-Sp* оксигармометра Балльхауса-Берри-Грина и калибровка нового уравнения для оценки окислительного состояния расплавов, насыщенных оливином и шпинелидом. *Геохимия* (4), 323-343.
2. Николаев Г.С., Арискин А.А., Бармина Г.С. (2018a) SPINMELT-2.0: Численное моделирование равновесия шпинелид – расплав в базальтовых системах при давлениях до 15 кбар. I. Формулировка, калибровка и тестирование модели. *Геохимия* (1), 28-49.

3. Николаев Г.С., Арискин А.А., Бармина Г.С. (2018b) SPINMELT-2.0: Численное моделирование равновесия шпинелид – расплав в базальтовых системах при давлениях до 15 кбар. II. Описание программы, топология модельной системы хромшпинелид-расплав и её петрологические приложения. *Геохимия* (2), 135-146.
4. Николаев Г.С. (2023) Влияние сульфидной серы на кристаллизацию магм нормальной щелочности (пролегомены). *Геохимия* 68(1), 27-47.

Результаты исследований по теме диссертации докладывались на 13 совещаниях и конференциях: XII, XVII, XVIII, XX, XXIII Международных конференциях «Физико-химические и петрофизические исследования в науках о Земле» (Москва, 2011, 2016, 2017, 2019, 2022 гг.), Всеросс. Ежегодных семинарах по экспериментальной минералогии, петрологии и геохимии (ВЕСЭМПГ, ГЕОХИ РАН, Москва) в 2012, 2016, 2017 гг., XII Международном платиновом симпозиуме (Екатеринбург, 2014), XII Всероссийском Петрографическом совещании (г. Петрозаводск, 2015), VIII Всероссийской научной конференции с международным участием «Петрология магматических и метаморфических комплексов» (Томск, 2016), V Международной конференции «Ультрамафит-мафитовые комплексы: геология, строение, рудный потенциал» (Гремячинск, 2017 г.), Всеросс. конференции, посвященной 120-летию со дня рождения выдающегося российского ученого академика А.Г. Бетехтина, «Основные проблемы в учении об эндогенных рудных месторождениях: новые горизонты» (Москва, 2017).

Диссертация проверена в системе антиплагиат. В диссертации соблюдены ссылки на авторов и источники заимствования материала.

Постановили:

Диссертация Георгия Сергеевича НИКОЛАЕВА **полностью соответствует требованиям ВАК**, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 1.6.4 - минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых.

Заключение принято на заседании расширенного семинара лаборатории термодинамики и математического моделирования природных процессов ГЕОХИ РАН 28 марта 2024 года. Присутствовало на заседании 41 человек, из них докторов наук 14 человек. Результаты голосования: «за» - единогласно. Протокол № 1 от 28 марта 2024 года.

Председатель семинара, д.х.н., г.н.с.,
зав.лаб. термодинамики и математического
моделирования природных процессов

В.А. Дорофеева

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).

119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.19. Телефон: + 7 (499) 137-14-84. Факс: + 7 (495) 938-20-54
Электронная почта: director@geokhi.ru. Сайт: www.geokhi.ru.