

УТВЕРЖДАЮ:

Директор Федерального
государственного бюджетного
учреждения науки Института геологии и
минералогии им. В.С. Соболева

Сибирского отделения Российской
академии наук,

академик-корреспондент РАН,

Круг Николай Николаевич



Н.Н. Круг

« *октябрь* »

2021 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института геологии и минералогии им. В.С. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук (ИГМ СО РАН)

Диссертация «Свободный рост несингулярных поверхностей кристаллов из растворов» выполнена в лаборатории физического и химического моделирования геологических процессов (№445) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института геологии и минералогии им. В.С. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук.

В период подготовки диссертации соискатель Томас Виктор Габриэлевич работал в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института геологии и минералогии им. В.С. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук в лаборатории физического и химического моделирования геологических процессов (№445) в должности старшего научного сотрудника.

В 1981 г. Томас В.Г. окончил геолого-геофизический факультет Новосибирского государственного университета (Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет») по специальности «инженер-геохимик». В 1992 году им защищена диссертация «Взаимодействие алюмосиликатного материала с азотом в условиях карботермического восстановления» на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 04.00.20 - «минералогия, кристаллография».

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Основная цель диссертационной работы В.Г. Томаса состоит в разработке физической модели роста несингулярных поверхностей кристаллов, адекватно описывающей реальные ростовые процессы.

В ходе выполнения исследования решались следующие **задачи**:

1. На модельных кристаллах проверялись и дополнялись имеющиеся эмпирические данные по росту несингулярных поверхностей при концентрации внимания на кинематике роста таких поверхностей и эволюции их фронта роста.

2. Исследовались тонкие детали внутреннего строения сформированных пирамид роста таких поверхностей, обусловленные специфическим механизмом их роста.

3. На базе собственных результатов и результатов предыдущих исследователей разработать физическую модель роста несингулярных поверхностей.

4. Оформив физическую модель в виде вычислительной программы для компьютера, провести численное моделирование изучаемых процессов и сопоставить его результаты с результатами реальных экспериментов по росту несингулярных поверхностей с целью проверки качественного и количественного соответствия модели реальному росту.

5. Продемонстрировать применимость предлагаемой физической модели для описания других вопросов реального кристаллогенеза.

Актуальность исследований. Вопросы о механизме роста кристаллов несингулярными поверхностями и, в целом, проблема регенерации кристаллов, привлекают внимание исследователей уже более столетия (Вульф, 1895; Артемьев, 1915; Шубников, 1935; Хонигман, 1961; Асхабов, 1979). Несмотря на обширную эмпирическую базу по этому вопросу, до недавнего времени не существовало единой теории, способной количественно описать процессы роста таких поверхностей, что говорит об актуальности ее разработки. Эта теория будет полезна и для исследований в области генетической минералогии в силу того, что морфологические формы регенерировавших кристаллов, в сравнении с формами кристаллов, растущих в квазистационарных условиях, оказываются существенно более информативными (Асхабов, 1979). Кроме того, промышленное выращивание кристаллов, по экономическим соображениям, часто сопряжено с ростом на затравки, параллельные несингулярным поверхностям. Наличие теоретической базы по рассматриваемому вопросу будет способствовать оптимизации ростовых процессов и повышению качества выращенного материала.

Наиболее важные научные результаты, полученные соискателем:

Экспериментально доказано, что грани наиболее быстрорастущих, возможных для данных ростовых условий, простых форм, не проявляющиеся в виде плоских участков на регенерирующих шарах, но фиксирующиеся в огранке субиндивидов, могут расти плоским фронтом при условии точной параллельности протяженной затравочной пластины этим граням.

Показано, что объем, сформированный растущей несингулярной поверхностью кристалла, представляют собой совокупность большого числа кристаллографически параллельных друг другу пирамид роста граней, ограняющих субиндивиды. По границам этих пирамид роста развиваются плоские краевые дислокации, порождающие системы напряжений, оптически различимые в виде так называемых свилей. Эти напряжения приводят к появлению локальных нарушений стехиометрии в областях, близких к таким границам, и образованию по границам наноразмерных включений посторонних фаз.

Предложена физическая модель процессов роста несингулярных поверхностей кристаллов из растворов. Сопоставлением результатов численного моделирования по этой модели с результатами реальных ростовых экспериментов показано полное качественное и хорошее количественное соответствие модели реальному росту. Тем самым **установлено**, что причиной формирования макроскопически шероховатого фронта роста несингулярной поверхности, состоящего из большого числа субиндивидов, является наличие на такой поверхности к моменту начала ее роста исходных и новообразованных микроскопических выступов и углублений.

Объяснены движущие силы геометрического отбора между субиндивидами на фронте роста несингулярных поверхностей: (а) неравенство скоростей роста граней различных простых форм, ограняющих субиндивиды, и (б) морфологические, геометрические и кристаллографические особенности элементов шероховатого рельефа этой поверхности перед началом ростового процесса.

Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации: основу диссертации составляют исследования, проведенные соискателем в период 1982-2021 гг. Личный вклад автора состоит в формулировке основной задачи исследования, предложения способа ее решения и его реализация; самостоятельном проведении большей

части ростовых экспериментов и интерпретации их результатов; все пошедшие в зачет диссертационной работы статьи написаны либо самим соискателем (бóльшая часть), либо при условии его большого вклада в окончательные варианты публикаций.

Высокая степень достоверности и обоснованности результатов проведенных исследований подтверждается тем фактом, что основные результаты диссертационной работы Томаса В.Г., ее научные положения и выводы опубликованы в ведущих международных научных журналах, отнесенных к квартилям Q1-Q2. Базой для получения этих результатов является успешное комбинирование различных методов исследования, как традиционных, так и самых современных. Основные положения диссертационной работы изложены на 11 крупных отечественных и международных конференциях.

Научная новизна работы состоит в том, что в ней впервые предлагается целостная физическая модель роста несингулярных поверхностей кристаллов, количественно описывающая результаты реальных ростовых экспериментов. Объяснен генезис макроскопически шероховатого фронта роста на таких объектах и движущие силы геометрического отбора между субиндивидами на растущих несингулярных поверхностях. В работе впервые изучены тонкие (наномасштабные) особенности внутреннего строения пирамид роста несингулярных поверхностей, получен ряд принципиально новых результатов, описывающих природу напряжений в таких кристаллах и объясняющих возникновение в них оптических аномалий – одного из основных диагностических признаков подобного материала. Продемонстрирована возможность использования предложенных в работе подходов для анализа других вопросов кристаллогенеза, связанных с регенерацией кристаллов.

Практическая значимость работы отражена в методических решениях, которые были реализованы в промышленных технологических процессах гидротермального роста кристаллов различных разновидностей берилла и корунда. В частности, на примере кристаллов этих соединений была продемонстрирована возможность роста отдельных быстрорастущих направлений плоским фронтом, позволяющая выращивать качественный кристаллический материал с экономически приемлемыми скоростями. Авторская методика выращивания кристаллов на выпукло-вогнутые затравки позволяет значительно упростить экспериментальное определение соотношений скоростей роста граней различных простых форм, повысить его точность и чувствительность. Предложенная физическая модель послужит отправной точкой для дальнейших исследований в области регенерации кристаллов и позволит ускорить разработку технологий роста новых кристаллов, использующих затравки, ориентированные параллельно несингулярным поверхностям.

Соответствие диссертации специальности, по которой она рекомендуется к защите. Диссертационная работа В.Г. Томаса представляет собой научно-квалификационную работу, посвященную исследованиям процессов роста несингулярных поверхностей кристаллов из растворов. Область исследования полностью соответствует формуле специальности 25.00.05 по геолого-минералогическим наукам, а именно пунктам: 3 - Физика минералов и современные методы исследования морфологии, внутреннего строения, структурного несовершенства, фазово-химической неоднородности и связанных с ними свойств реальных минералов, изучение их вариаций в зависимости от условий образования и изменения в природных и технологических процессах; 11 — Экспериментальная минералогия; 15 — Проблемы теоретической и практической кристаллохимии; 19 — Методы выращивания монокристаллов; 21 — Математическое моделирование кристаллических структур и свойств минералов.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем. Основные научные результаты и материалы диссертационного исследования достаточно полно изложены в научных публикациях соискателя В.Г. Томаса (с соавторами). Соискатель имеет 100 опубликованных работ, из них по теме диссертации опубликованы 18 научных работ в научных журналах и изданиях, которые включены в

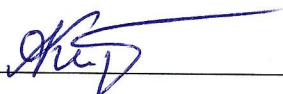
перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций и 14 работ в материалах всероссийских и международных конференций, получен 1 патент РФ.

Основные публикации соискателя, в которых опубликованы материалы диссертации:

1. **Томас В.Г.** О механизме транспорта вещества при гидротермальном росте кристаллов корунда в бикарбонатных растворах // Геология и геофизика. - 1996. - №7. - с. 96–99.
2. **Thomas V.G.**, Mashkovtsev R.I., Smirnov S.Z., Mal'tsev V.S. Tairus hydrothermal Synthetic Sapphires Doped with Nickel and Chromium // Gems & Gemology. - 1997. - №3. - p.188 - 202.
3. **Thomas V.G.**, Demin S.P., Fursenko D.A., Bekker T.B. Pulsation process at hydrothermal crystal growth (beryl as example) // J. of Crystal Growth. - 1999. - V.206. - №3. - p.203 - 214.
4. Машковцев Р.И, Стоянов Е.С., **Томас В.Г.** Состояние молекул и ионов в структурных каналах синтетического берилла с примесью аммония // Ж. Структ. Химии. - 2004. - Т.45. - №1. - с. 59-66.
5. Smirnov S.Z., **Thomas V.G.**, Demin S.P, Drebuschak V.A. Experimental study of boron solubility and speciation in $\text{Na}_2\text{O} - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{SiO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ system // Chemical Geology. - 2005. - Т.223. - p.16-34.
6. Гаврюшкин П.Н., **Томас В.Г.** Кинематика роста регенерационных поверхностей кристаллов // Кристаллография. – 2009. - Т.54. - №2. с.359 – 367.
7. **Томас В.Г.**, Гаврюшкин П.Н., Фурсенко Д.А. Двумерное моделирование роста регенерационных поверхностей кристаллов // Кристаллография. - 2012. - Т.57. - №6. - с. 962-974.
8. Smirnov S.Z., **Thomas V.G.**, Kamenetsky V.S., Kozmenko O. A. , Large R.R. Hydrosilicate Liquids in the System $\text{Na}_2\text{O}-\text{SiO}_2-\text{H}_2\text{O}$ with NaF, NaCl and Ta: Evaluation of Their Role in Ore and Mineral Formation at High T and P // Петрология. - 2012. - Т.20. - №3. - с.300–314.
9. **Томас В.Г.**, Смирнов С.З., Козьменко О.А., Дребущак В.А., Каменецкий В.С. Образование и свойства водно-силикатных жидкостей в системах $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2-\text{H}_2\text{O}$ и гранит- $\text{Na}_2\text{O}-\text{SiO}_2-\text{H}_2\text{O}$ при 600°C и 1.5 кбар // Петрология. - 2014. - Т.22. - №3. - с.327–344.
10. **Томас В.Г.**, Гаврюшкин П.Н., Фурсенко Д.А. Регенерация сферической поверхности монокристаллического шара: численное 2D-моделирование // Кристаллография. - 2015. - Т.60. - с. 640-650.
11. Mashkovtsev R.I., **Thomas V.G.**, Fursenko D.A., Zhukova E.S., Uskov V.V., Gorshunov V.P. FTIR spectroscopy of D_2O and HDO molecules in the c-axis channels of synthetic beryl. // American Mineralogist. - 2016. - V.101. - №1.- p. 175-180.
12. Смирнов С.З., **Томас В.Г.**, Каменецкий В.С., Козьменко О.А. Водно-силикатные жидкости в системе редкометалльный гранит- $\text{Na}_2\text{O}-\text{SiO}_2-\text{H}_2\text{O}$ как концентраторы рудных компонентов при высоких давлениях и температуре. // Петрология. - 2017. - Т.25. - №6. - с.646–658.
13. **Thomas V.G.** , Daneu N. , Rečnik A. , Fursenko D. A. , Demin S.P., Belinsky S.P., Gavryushkin P.N. Crystallographic assembly of macroscopic crystals by sub-parallel splicing of multiple seeds // Crystal Growth & Design. - 2017. - V.17. - №2. - p.763 - 773.

14. **Thomas V.G.**, Daneu N., Rečnik A., Mashkovtsev R.I., Dražić G., Drev S., Demin S.P., Gavryushkin P.N., Fursenko D. A. Micro-sectoriality in hydrothermally grown ruby crystals: The internal structure of the boundaries of the growth sectors // CrystEngComm. - 2017. - V.19. - №44. - p.6594 - 6601.
15. **Thomas V.G.**, Fursenko D. A. Antiskeletal Morphology of Crystals as a Possible Result of Their Regeneration // Crystal Growth & Design. - 2018. - V.18. - №5. - p.2912-2917.
16. **Thomas V.G.**, Daneu N., Mashkovtsev R.I., Rečnik A., Fursenko D. A. The internal structure of hydrothermally grown leucosapphire crystals // CrystEngComm. - 2019. - V.21. - №7. - p.1122-1129.
17. Kovalev V.N., **Thomas V.G.**, Fursenko D.A. Quantitative Analysis of the Regenerating Single-Crystal Ball Evolution. // Crystal Growth & Design, 2019, 19(6), 3206-3214.
18. Belyanchikov M.A., Abramov P.A., Ragozin A.L., Fursenko D.A., Gorshunov B., **Thomas V.G.** Distribution of D₂O molecules of the first and second type in hydrothermally grown beryl crystals. // Crystal Growth & Design, 2021, <https://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.0c01702>.

Диссертация «Свободный рост несингулярных поверхностей кристаллов из растворов» Томаса Виктора Габриэлевича рекомендуется к защите на соискание учёной степени доктора геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 - «минералогия, кристаллография». Заключение принято на межлабораторном семинаре, посвященном предзащите представляемой диссертации. Присутствовало на семинаре - 17 человек (из них 9 докторов геол.-мин. наук, по 1 доктору технических наук и химических наук, 3 кандидата геол.-мин. наук и 1 научный сотрудник без степени). Результаты открытого голосования по вопросу принятия заключения по диссертации В.Г. Томаса: «за» - 17 чел., «против» - 0 чел., «воздержалось» - 0 чел.



*Кирдяшкин Алексей Анатольевич,
доктор геолого-минералогических наук,
зав. лабораторией физического и
химического моделирования
геологических процессов (№445)
ИГМСО РАН*