

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Шостака Никиты Андреевича

«Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Шостака Н.А. посвящена разработке физико-математического аппарата описания процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур. Рассматриваемая тематика находится на стыке физики конденсированного состояния, статистической физики, термодинамики фазовых переходов и математического моделирования многофазных процессов.

Актуальность выполненного исследования не вызывает сомнений. Клатратные гидраты являются особым классом каркасных конденсированных систем включения, свойства которых определяются не только внешними термобарическими условиями, но и структурой водного каркаса, характером взаимодействия молекул-гостей с полостями решетки, степенью заполнения полостей, кинетикой роста и условиями диссоциации. В связи с этим задача построения согласованного описания, связывающего молекулярно-структурный и макроскопический уровни, является существенной для развития физики конденсированного состояния.

Из автореферата следует, что целью диссертационной работы являлось создание и обоснование единого комплекса физико-математических моделей, объединяющего микро- и макроуровни описания процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II газообразных и жидких гидратообразователей в широком диапазоне термобарических условий. Такая постановка задачи представляется научно обоснованной, поскольку большинство известных подходов описывает отдельные стороны гидратообразования – равновесие, кинетику, распределение компонентов или диссоциацию – без их полного объединения в единую расчетную схему.

К числу наиболее значимых результатов диссертационной работы следует отнести разработку согласованного комплекса моделей образования и диссоциации гидратов кубических структур; физическую интерпретацию гидратной фазы как каркасной конденсированной системы с включенной фазой; описание молекулярных

и энергетических параметров гидратообразования; введение псевдокритических и приведенных параметров, учитывающих молярную поляризуемость компонентов; построение моделей распределения компонентов между гидратной фазой и окружающей средой; а также описание термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов с учетом метастабильных состояний.

Особый интерес представляет попытка автора связать параметры заполнения полостей, энергетические характеристики включения молекул и макроскопические равновесные условия. Такой подход позволяет рассматривать клатратные гидраты не только как объект прикладной технологии, но и как физическую систему, в которой структура водородносвязанного каркаса, локальное состояние включенных молекул и внешние термобарические условия совместно определяют устойчивость и кинетику фазового превращения.

Следует отметить и практическую значимость работы. Разработанные расчетные соотношения могут быть использованы при прогнозировании условий образования и диссоциации гидратов, определении устойчивых и метастабильных состояний гидратной фазы, оценке состава гидратов многокомпонентных систем, а также при анализе технологических процессов, связанных с предупреждением и управляемой диссоциацией гидратов. По материалам диссертационного исследования опубликовано значительное число научных работ, включая статьи в рецензируемых изданиях, монографии, патенты, что свидетельствует о достаточной апробации полученных результатов.

Достоверность представленных результатов обеспечивается использованием известных положений статистической физики, термодинамики фазовых переходов, балансовых соотношений, уравнений тепло- и массопереноса, а также сопоставлением расчетных данных с опубликованными экспериментальными результатами для индивидуальных и многокомпонентных гидратообразующих систем. Выводы автора в целом логично следуют из поставленных задач и полученных расчетных результатов.

Замечание

В автореферате основное внимание уделено влиянию состава гидратообразующей фазы, температуры и давления на параметры образования и диссоциации клатратных гидратов. Вместе с тем, в дальнейшем развитии работы было бы интересно рассмотреть возможное влияние изотопного состава воды, прежде всего

соотношения протий/дейтерий, на параметры водородносвязанного каркаса, энергетические характеристики полостей и кинетику образования гидратной фазы. Данное замечание носит рекомендательный характер и не снижает общей положительной оценки диссертационной работы.

Заключение

Сделанное замечание не снижает научной новизны, достоверности и практической значимости выполненного исследования. Диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (пп. 9-14), утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук
(1.3.8 – Физика конденсированного состояния),
ведущий научный сотрудник,
заведующий лабораторией проблем распределения
стабильных изотопов в живых системах
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки «Федеральный исследовательский центр
Южный научный центр
Российской академии наук» _____ / С.С. Джимак /

Адрес организации: 344006, г. Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41

Тел.: (863) 250-98-29

E-mail: jimack@mail.ru

«01» сентября 2026 г.

Подпись <u>С.С. Джимак</u>
Заверяю:
Ученый секретарь ЮНЦ РАН
<u>Булмиса А.А.</u>
«01» <u>сентября</u> 2026 г.

