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 актуальной проблеме физики конденсированного состояния – разработке физико-математического описания процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур. Рассматриваемые в работе клатратные гидраты представляют собой особый класс каркасных конденсированных систем включения, физические свойства которых определяются структурой водного каркаса, локализацией гостевых молекул в полостях, характером межмолекулярных взаимодействий, температурой, давлением и составом гидратообразующей среды.

Актуальность темы исследования не вызывает сомнений. Клатратные гидраты занимают промежуточное положение между молекулярно-структурными объектами и макроскопическими фазовыми системами. Поэтому для их описания недостаточно только эмпирического задания равновесных кривых или отдельных кинетических зависимостей. Необходим связующий уровень, позволяющий интерпретировать макроскопические характеристики гидратообразования через параметры заполнения полостей, энергетическое состояние включенных молекул и устойчивость каркасной структуры.

Из автореферата следует, что автором осуществлено развитие физически интерпретируемого мезоскопического описания клатратных гидратов как каркасных конденсированных систем с локализованным гостевым компонентом и построен связующий уровень между молекулярным заполнением полостей и макроскопическими характеристиками гидратообразования – равновесием, составом, кинетикой и метастабильностью. Такая постановка задачи представляется научно обоснованной и соответствует современным взглядам о необходимости многоуровневого описания сложных конденсированных систем.

Научная новизна работы состоит в разработке согласованного комплекса физико-математических моделей, объединяющего структурный, термодинамический, кинетический и механический аспекты образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II. Существенным является то, что гидратная фаза рассматривается автором не как формальный расчетный объект, а как упорядоченная каркасная система, в которой локальные параметры включения молекул-гостей определяют условия фазовой устойчивости и особенности перехода между равновесными, неравновесными и метастабильными состояниями.

К числу наиболее значимых результатов, отраженных в автореферате, следует отнести разработку расчетных соотношений для описания молекулярных, структурных и энергетических параметров гидратов; введение псевдокритических и приведенных параметров гидратообразования; учет молярной поляризуемости компонентов; моделирование распределения компонентов между гидратной и внешней фазами; описание образования и диссоциации гидратов газообразных, жидких и сверхкритических гидратообразователей; а также анализ термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов.

Особое значение имеет попытка автора связать уровень заполнения полостей и локальной стабилизации гидратного каркаса с равновесными термобарическими условиями, составом гидратной фазы, кинетикой роста и возможностью метастабильного существования. Такой подход позволяет рассматривать клатратные гидраты как физически организованные конденсированные системы, а не только как объект прикладных расчетов в нефтегазовых и технологических задачах.

Теоретическая значимость диссертационной работы заключается в развитии физико-математического аппарата описания клатратных гидратов как каркасных конденсированных систем включения. Практическая значимость определяется возможностью использования предложенных моделей для прогнозирования условий образования, устойчивости и диссоциации гидратной фазы в природных, лабораторных и технологических системах. Представленные в автореферате сведения о публикациях, патентах, апробации и использовании результатов свидетельствуют о достаточной полноте представления основных результатов диссертации научному сообществу.

Достоверность результатов обеспечивается использованием известных положений статистической физики, термодинамики фазовых равновесий, кинетики фазовых превращений, балансовых соотношений и уравнений тепло- и массопереноса. Существенным подтверждением достоверности является сопоставление расчетных результатов с опубликованными экспериментальными и справочными данными для различных гидратообразователей и структур гидратов. Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертационной работы, ее научную новизну, теоретическую и практическую значимость, положения, выносимые на защиту, и основные выводы.

Содержание автореферата соответствует паспорту специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, поскольку работа посвящена математическому моделированию фазовых переходов, фазовых диаграмм, устойчивости, метастабильности и физических свойств упорядоченных каркасных конденсированных систем в зависимости от температуры, давления и состава.

Диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» является завершенной научно-

квалификационной работой, соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук, профессор
профессор кафедры теоретической физики
и компьютерных технологий
ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»

_____ / В.А. Исаев /

«16» октября 2026 г.

Адрес организации: 350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149
E-mail: vlisaev@rambler.ru
Тел.: +7 (918) 1323379

Подпись Исаева В.А. удостоверяю:
Ученый секретарь
совета университета, к.ф.н., доцент Е.М. Касьянова