

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 Никиты Андреевича посвящена разработке комплекса физико-математических моделей образования, роста, метастабильного существования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур. Тематика работы является актуальной для физики конденсированного состояния, поскольку клатратные гидраты представляют собой упорядоченные каркасные конденсированные системы включения, свойства которых определяются структурой водного каркаса, природой молекул-гостей, степенью заполнения полостей, температурой, давлением и условиями фазового превращения.

В автореферате показано, что существующие подходы к описанию клатратных гидратов, включая статистико-термодинамические, кинетические и молекулярно-динамические модели, как правило, охватывают отдельные стороны явления. В связи с этим задача построения согласованного аппарата, связывающего микроструктурные параметры гидратной решетки с макроскопическими характеристиками фазовой устойчивости, кинетики и диссоциации, представляется научно значимой и своевременной.

К числу наиболее существенных результатов работы следует отнести разработку согласованного комплекса моделей для клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II; использование принципа энергетического подобия при описании включения молекул в гидратные полости; развитие расчетных соотношений для молекулярных и энергетических параметров гидратов; построение зависимостей для равновесных термобарических условий индивидуальных и многокомпонентных гидратообразующих систем; введение псевдокритических и приведенных параметров гидратообразования, учитывающих молярную поляризуемость компонентов; а также формулировку модели неравновесного распределения компонентов между гидратной и окружающей фазами.

Отдельного внимания заслуживает то, что в работе процессы диссоциации гидратов рассматриваются не только как обратный равновесный переход, но и как неравновесное разрушение каркасной структуры,

сопряженное с тепло- и массопереносом, метастабильными состояниями и механической устойчивостью гидратной фазы. Такой подход позволяет рассматривать гидрат как физическое тело с определенным структурным и механическим состоянием, а не только как фазу, положение которой определяется равновесной линией на Р–Т-диаграмме.

Научная новизна работы заключается в том, что автором предложен многоуровневый физико-математический аппарат, объединяющий структурно-термодинамическое описание гидратной решетки, расчет заполнения полостей, фазовые равновесия, неравновесную кинетику образования, распределение компонентов, диссоциацию и механическое состояние гидратной фазы. В рамках автореферата достаточно ясно показано, что эти блоки не являются независимыми расчетными процедурами, а образуют единую логику описания клатратных гидратов как каркасных конденсированных систем.

Достоверность представленных результатов подтверждается сопоставлением расчетных данных с опубликованными экспериментальными сведениями для индивидуальных и многокомпонентных гидратообразующих систем, согласованностью полученных зависимостей с известными физическими закономерностями и публикацией основных результатов в рецензируемых научных изданиях. Значительный объем публикаций, включая работы в журналах, индексируемых в международных базах данных, а также наличие патентов подтверждают апробацию и практическую значимость выполненных исследований.

Следует отметить некоторые замечания и вопросы по автореферату:

1. В работе проводится переход от микроструктурного описания к макроскопическим термобарическим и кинетическим характеристикам. Представляется целесообразным в дальнейшем развитии темы более подробно сопоставить предложенный аппарат с результатами атомистического моделирования, включая молекулярную динамику и расчеты потенциалов взаимодействия «гость – водный каркас».

2. Автореферат содержит большое число результатов, относящихся к различным уровням описания – структурному, термодинамическому, кинетическому и механическому. Для более наглядного восприятия было бы полезно дополнить автореферат компактной схемой, показывающей иерархию разработанных моделей и переход от параметров гидратной решетки к фазовым равновесиям, кинетике и диссоциации.

Указанные замечания носят рекомендательный характер и не снижают научной значимости полученных результатов. Автореферат дает достаточное представление о содержании диссертационной работы, ее научной новизне, теоретической и практической значимости, а также обоснованности основных положений, выносимых на защиту.

Считаю, что диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» 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.

Заместитель директора по науке,
заведующий Центром компьютерного моделирования
неорганических и композитных наноразмерных материалов,
ведущий научный сотрудник

ФГБУН Институт биохимической физики

им. Н.М. Эмануэля РАН,

доктор физико-математических наук, доцент

(01.04.07 – Физика конденсированного состояния)



Д.Г. Квашнин

119334, Российская Федерация, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

Тел.: +7 (495) 939-71-46

E-mail: dgkvashnin@phystech.edu

«07» сентября 2026 г.

Подпись Д.Г. Квашнина заверяю:

Ведущий специалист

Научно-организационного отдела ИБХФ РАН

к.х.н. Сульимова Наталья Борисовна

