

## 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 – разработке физико-математического описания процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур. Рассматриваемые в работе клатратные гидраты представляют собой каркасные конденсированные системы включения, физические свойства которых определяются строением водного каркаса, природой гостевых молекул, заполнением полостей, термобарическими условиями и характером фазового перехода.

Актуальность работы обусловлена тем, что клатратные гидраты находятся на пересечении физики конденсированных сред, статистической термодинамики, кинетики фазовых превращений и физики многофазных систем. Несмотря на значительный объем экспериментальных данных, единое описание, связывающее молекулярные параметры взаимодействия с макроскопическими характеристиками фазовой устойчивости, кинетики образования, диссоциации и метастабильности гидратной фазы, остается сложной и востребованной задачей.

Из автореферата следует, что целью диссертационной работы являлось создание и обоснование согласованного комплекса физико-математических моделей, объединяющего микро- и макроуровни описания процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II в широком диапазоне термобарических условий. Такая постановка задачи представляется обоснованной и соответствует современному уровню развития исследований каркасных и молекулярно-организованных конденсированных систем.

К числу наиболее существенных результатов, представленных в автореферате, следует отнести разработку модели образования клатратных гидратов, основанной на принципе энергетического подобия с процессом включения молекул в полости водного каркаса, получение расчетных соотношений для определения молекулярных, энергетических и структурных параметров гидратов, введение псевдокритических и приведенных параметров гидратообразования, учитывающих молярную поляризуемость компонентов, разработку модели распределения компонентов между гидратной и внешней



фазами с учетом неравновесности, а также построение моделей термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов.

Теоретическая значимость диссертационной работы заключается в развитии физико-математического аппарата описания клатратных гидратов как конденсированных систем включения. Практическая значимость обусловлена возможностью применения полученных моделей для расчета условий образования, устойчивости и диссоциации гидратной фазы в природных, лабораторных и технологических системах. Представленные в автореферате сведения о публикациях, патентах и внедрении результатов свидетельствуют о достаточной апробации основных положений диссертации.

Достоверность полученных результатов подтверждается использованием известных положений термодинамики фазовых равновесий, статистического описания заполнения полостей, уравнений тепло- и массопереноса, сопоставлением расчетных результатов с экспериментальными и справочными данными, а также публикацией основных результатов в рецензируемых научных изданиях. Автореферат написан достаточно ясно, отражает структуру диссертации, основные результаты и положения, выносимые на защиту.

Замечания:

1. В автореферате приведены данные о высокой согласованности расчетных и экспериментальных результатов для различных групп гидратообразователей. Вместе с тем было бы полезно более явно охарактеризовать чувствительность отдельных расчетных зависимостей к разбросу и неопределенности исходных литературных экспериментальных данных, особенно для тех систем, по которым число надежных измерений ограничено или данные разных авторов расходятся.

2. В работе предложена содержательная физическая интерпретация заполнения полостей, энергетических параметров и состояния включенных молекул в гидратном каркасе. С учетом междисциплинарного характера темы было бы интересно дополнительно обсудить, какие независимые методы – калориметрические, спектроскопические, дифракционные или молекулярно-динамические – могут быть использованы для дальнейшей проверки отдельных структурно-энергетических представлений, положенных в основу модели.

Указанные замечания носят рекомендательный характер, не снижают научной новизны и практической значимости выполненной работы и могут быть учтены автором при дальнейшем развитии предложенного подхода.

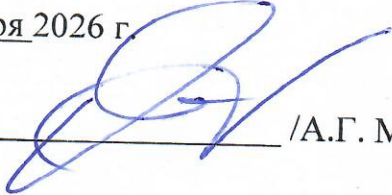
Считаю, что диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации

клатратных гидратов кубических структур» является законченной 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.

Мартынов Александр Германович  
член-корреспондент РАН, доктор химических наук,  
Главный научный сотрудник лаборатории новых  
физико-химических проблем  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина  
Российской академии наук  
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4  
Тел.: +7 (495) 955-46-27  
E-mail: martynov@phychе.ac.ru

Даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

« 3 » сентября 2026 г.

Подпись:  /А.Г. Мартынов/

Подпись А.Г. Мартынова заверяю:

Подпись Мартынова А.Г. заверяю

Секретарь Ученого совета ИФХЭ РАН

Кандидат химических наук Варшавская Ираида Германовна

Подпись:  /Варшавская И.Г./

