ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.308.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Х.М. БЕРБЕКОВА» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 06.11.2026 г. № 11

О присуждении Шостаку Никите Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук

Диссертация «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния принята к защите 03.06.2026 г. (протокол заседания № 6) диссертационным советом 24.2.308.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173, приказом Минобрнауки России от 02.11.2012 г. № 714/нк.

Соискатель Шостак Никита Андреевич, 1 июля 1988 года рождения, диссертацию на соискание ученой степени кандидата технических наук «Моделирование образования и диссоциации гидратов при разработке и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений» защитил в 2015 году в диссертационном совете ДМ 212.100.08, созданном на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Кубанский государственный технологический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, работает старшим научным сотрудником Научно-технологического центра микроэлектроники и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в Научно-технологическом центре микроэлектроники и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант – доктор технических наук Запорожец Евгений Петрович, пенсионер.

Официальные оппоненты:

Гималтдинов Ильяс Кадирович, доктор физико-математических наук, член-корреспондент АН Республики Башкортостан, профессор, заведующий кафедрой «Физика» ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет», г. Уфа;

Стрижак Павел Александрович, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, профессор, заведующий лабораторией тепломассопереноса ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск;

Чернов Андрей Александрович, доктор физико-математических наук, профессор РАН, главный научный сотрудник лаборатории синтеза новых материалов ФГБУН Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Якутский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук»; обособленное подразделение – Институт проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской академии наук, г. Якутск, в своем положительном отзыве, подписанном Рожиным Игорем Ивановичем, доктором технических наук, главным научным сотрудником лаборатории техногенных газовых гидратов ИПНГ СО РАН, и утвержденном Лебедевым Михаилом Петровичем, доктором технических наук, профессором, академиком РАН, генеральным директором ФГБУН ФИЦ «Якутский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», указала, что диссертация представляет собой завершенное научно-квалификационное исследование, в котором решена крупная научная проблема, заключающаяся в разработке согласованного физико-математического аппарата для описания образования, роста, устойчивости, метастабильного существования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур, а совокупность разработанных теоретических положений, моделей, закономерностей и методов может быть квалифицирована как научное достижение в области физики конденсированного состояния. Разработанные в диссертации зависимости и расчетные методы могут быть использованы при определении равновесных термобарических условий гидратообразования многокомпонентных газов, прогнозировании состава образующейся гидратной фазы, оценке кинетических режимов образования и диссоциации гидратов, а также при выборе безгидратных режимов эксплуатации скважин и наземных газотранспортных систем. Модели термобарической диссоциации могут применяться при расчетном обосновании способов разрушения техногенных гидратных образований и анализе процессов разработки природных газогидратных залежей.

Соискатель имеет 194 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 68 работ, из них: 3 монографии; 28 статей в рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК при Минобрнауки России; 12 – в изданиях, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования Web of Science и Scopus; 12 патентов на изобретения РФ; 1 свидетельство о государственной регистрации базы данных; 12 – в материалах конференций и прочих изданиях.

Наиболее значимые работы по теме диссертации:

1. Шостак Н. А. Определение термобарических параметров для систем многокомпонентных газообразных и жидких гидратообразователей // Химическая физика и мезоскопия. – 2026. – Т. 28, № 2. – С. 166–176.

2. Shostak N. A. Hydrates beyond the critical point: toward a pseudo-critical description of clathrate hydrate formation // Phase Transitions. – 2026. – Vol. 99, no. 3–4. – P. 472–483. https://doi.org/10.1080/01411594.2026.2653003.

3. Шостак Н. А. Параметр неравновесности гидратообразования и его применение для интерпретации состава гидратной фазы // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. – 2026. – Т. 16, № 1. – С. 38–41.

4. Шостак Н. А. Особенности определения удельной энергии гидратообразования // Журнал технической физики. – 2025. – Т. 95, вып. 8. – С. 1516–1521.

5. Шостак Н. А. Особенности определения параметров кристаллической решетки из льдоподобных ассоциатов молекул воды при гидратообразовании // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – № 16. – С. 1071–1078.

6. Шостак Н. А., Запорожец Е. П. Расчеты гидратных процессов: монография. – Краснодар: Издательский Дом – Юг, 2018. – 204 с.

На диссертацию и автореферат поступили положительные отзывы:

Положительный отзыв от официального оппонента Гималтдинова Ильяса Кадировича содержит следующие замечания и вопросы:

- В диссертации предложены новые корреляционные зависимости для описания равновесных термобарических условий гидратообразования и введены псевдокритические параметры, взвешенные по молярной поляризуемости компонентов. Вместе с тем в работе можно было бы подробнее сопоставить данный подход с традиционными правилами смешения и статистико-термодинамическими моделями, чтобы более явно показать область, в которой введение поляризуемости дает наибольший физический и расчетный выигрыш.

- В разделе, посвященном распределению компонентов между гидратной фазой и окружающей средой, основное внимание уделено расчетной схеме и материальному балансу. При этом полезно было бы шире обсудить предельные случаи: малую глубину превращения, практически неравновесное распределение, а также ситуации, в которых один из компонентов преимущественно заполняет только один тип полостей. Такое обсуждение сделало бы физическую интерпретацию модели более наглядной.

- Гидратная фаза рассматривается как квазихрупкое тело, а предельные состояния анализируются с использованием кругов Мора и подхода Мора–Кулона (глава 5). Вместе с тем, в дальнейшем развитии модели целесообразно учесть влияние исходной дефектности гидратного образца, скорости депрессионного воздействия и возможной неоднородности напряженного состояния, поскольку эти факторы могут влиять на момент перехода от целостного к разрушенному состоянию гидрата.

Положительный отзыв от официального оппонента Стрижака Павла Александровича, в котором имеются следующие замечания и рекомендации:

- В первой главе перечислены известные теоретические подходы и модели, с применением которых можно рассчитать условия зарождения и диссоциации гидратов различных структур и из разных газов. Целесообразно было бы обобщить границы их применимости и ключевые недостатки в сравнительной форме в виде таблицы. Для докторских диссертаций важно концентрированно и критически проанализировать задел мировой науки по проблематике.

- При формулировании моделей автор использует совокупность эмпирических констант из экспериментов, которые получены в определенных условиях и не всегда могут быть перенесены на другие объекты. Целесообразно было бы обобщить данные по соответствующим эмпирическим константам (на примере диссертации и других известных работ коллег) и с применением методов искусственного интеллекта создать базу для масштабирования и переноса на другие условия. В таком случае можно было бы закрыть целую отрасль комплексными моделями.

- При описании физических моделей не хватает схематичных представлений о моделируемых объектах с учетом реальных конфигураций гидратных пластов, порошка,

пленок, каркасов и других структур из экспериментов и испытаний. Такие схемы в мировой литературе имеются. Интересно с ними сравнить модели автора диссертации.

- При представлении экспериментальных данных для валидации модели важно строго описать доверительные интервалы в опытах, погрешности средств измерений, допущения при постановке задач, параметры расчетных сеток и другие важные аспекты.

- В технологических условиях гидраты содержат совокупность газов. Смесевые гидраты представляют большой интерес. Особенно интересно сравнить природные и техногенные гидраты с близкими по основным газам составами.

- Интерес представляет, как в созданных моделях автора учитывается рецикличность использования компонентов и воды при синтезе и регазификации гидратов. Такие процессы являются типичными для природных и техногенных гидратов.

- Целесообразно выполнить расчет таких параметров на любом из известных реакторов (имеются публикации в России, Японии, Китае, Европе, США) по объему с учетом экономии, эксплуатации и энергетики. Понятно, что диссертация автора подготовлена на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, но практические аспекты важно раскрыть на конкретных примерах.

- Представленные в диссертации модели доступны не всем инженерам-технологам для применения, так как требуется специальная физико-математическая подготовка. По итогу обобщения результатов целесообразно было бы сформулировать упрощенные инженерные выражения для применения на практике с учетом этапов гидратообразования и диссоциации, а также указать ориентировочную точность прогнозирования при их применении.

Положительный отзыв от официального оппонента Чернова Андрея Александровича содержит следующие замечания:

- В главе II вводится гипотеза о «псевдосжиженном» состоянии поглощенных молекул в полостях водного каркаса, а также допущение о возможном заполнении части полостей молекулами воды. Эти положения используются для уточнения молекулярных и энергетических параметров гидратов (формулы (2.2.1), (2.2.5), (2.2.12)–(2.2.14)).

Какова физическая интерпретация «псевдосжиженного» состояния? Означает ли это, что молекула-гость сохраняет трансляционную подвижность, или речь идет о локальном высокоплотном состоянии с ограниченной подвижностью? Как это соотносится с известными данными о вращательных и либрационных движениях гостей в полостях?

Допущение о заполнении полостей молекулами воды представляется нетривиальным. Как автор оценивает вероятность такого события? Есть ли экспериментальные подтверждения (кроме ссылки на Я.С. Липковского [130])? Насколько чувствительны результаты (гидратное число, плотность) к значениям введенных автором констант Ленгмюра для воды, которые не входят в стандартную теорию Ван-дер-Ваальса–Платтеу и требуют отдельного физического обоснования?

- В разделе 2.2.4 автор сравнивает семь методик определения констант Ленгмюра и показывает, что расхождения в гидратных числах достигают 28 % (таблица 2.2.19), особенно для CO_2, H_2S и N_2. В качестве предпочтительной рекомендуется методика Пэрриша–Прауснитца (с. 89), выбранная по минимуму отклонения от экспериментальных значений гидратного числа.

Насколько устойчивы выводы глав II–III к выбору методики? Как расхождения в гидратном числе (до 13,9 % для CO_2 и 24,1 % для H_2S) переносятся в макроскопические параметры – плотность, теплоту образования, равновесную температуру? Было бы полезно

оценить чувствительность конечных результатов к выбору методики; возможно, для этого достаточно ограничиться единой методикой для всех газов.

- В главе III вводятся псевдокритические параметры гидратообразования (формулы (3.4.1), (3.4.2)), взвешенные по молярной поляризуемости компонентов, и это позиционируется как «распространение идей закона соответственных состояний на область гидратных систем» (с. 138–139).

Насколько строгой и физически обоснованной является эта аналогия? В гидратных системах определяющую роль играют водородные связи и геометрия полостей, а не только центральные силы, для которых справедлив классический закон соответственных состояний. Обоснование выбора молярной поляризуемости α в качестве весового фактора опирается на корреляцию с дисперсионно-индукционными взаимодействиями, однако для полярных молекул (H_2S, SO_2, CO_2) дипольный и квадрупольный моменты могут играть не меньшую роль. Почему не рассматривается, например, комбинация α с дипольным моментом? Насколько универсальны коэффициенты (3.4.1)–(3.4.2) и проверялась ли модель на системах, не вошедших в выборку, например для гидратов фторсодержащих соединений (CHF_3, CH_2F_2)?

- В главе IV вводится гидратный аналог числа Дамкелера $Da_H = \tau/\tau_p$ (формула (4.1.30)), где τ – характерное время фазового превращения, τ_p – время достижения равновесного состояния; параметр неравновесности ℵ связан с Da_H через релаксационную зависимость (4.1.29).

Как определяется τ_p, если для гидратных систем это время само зависит от кинетики (диффузии, теплопереноса)? Как выбирается параметр m в уравнении (4.1.29) и есть ли для этого физические критерии? Насколько чувствительны результаты главы IV (распределение компонентов, скорости роста) к выбору функциональной формы ℵ (Da_H)?

Было бы также полезно дополнить анализ обобщенной режимной диаграммой с областями теплового, диффузионного, кинетического и смешанного ограничения роста и диссоциации гидратной фазы.

- В разделе 4.2.2 вводится число Био для гидратной системы (формула (4.2.7)), при этом теплопроводность гидрата λ_c принимается фиксированной. Насколько корректно это для системы, где теплопроводность зависит от температуры, степени заполнения полостей и наличия дефектов? Как это влияет на оценку числа Bi_H и на классификацию режимов роста?

В уравнении (4.2.6) для коэффициента теплопередачи через стенку учитывается термическое сопротивление слоев, но не учитывается возможное образование газовых прослоек или адсорбционных слоев на поверхности гидрата. Насколько это существенно для реальных систем?

Также представляет интерес анализ чувствительности получаемых скоростей роста к выбору коэффициентов теплоотдачи, толщины гидратного слоя и эффективной теплопроводности, поскольку именно эти параметры в реальных системах часто определяются с наибольшей неопределенностью.

- В главе V вводится интегральный термомеханический критерий разрушения $M = \sigma_{max}/\sigma_{cr} + \Delta G_+/\Delta G_{re}$ (формула (5.4.3)) для описания совместного действия механических напряжений и термодинамической движущей силы распада.

Как определяется ΔG_{re} – «характерный энергетический масштаб, соответствующий энергии разрушения межмолекулярных связей»? В работе этот параметр не конкретизирован. Если ΔG_{re} – это энергия разрыва водородных связей, то она зависит от температуры и структуры (КС-I или КС-II). Как это учитывается?

Критерий M предполагает аддитивность механического и термодинамического вкладов, однако в реальных условиях эти процессы могут быть синергетическими

(например, развитие трещины облегчает диффузию газа и ускоряет диссоциацию). Не является ли аддитивная форма упрощением? Рассматривались ли нелинейные комбинации?

- В главе VI (раздел 6.5) автор указывает, что «перспективным направлением является учет дефектности и морфологии гидратной фазы (пористость, трещиноватость, размерные эффекты)». Однако в основных главах эти факторы практически не учитываются.

Насколько существенно влияние дефектности на результаты глав II и V? В главе II плотность гидрата рассчитывается по формуле (2.2.7) в предположении идеальной кристаллической решетки, тогда как в реальных гидратах плотность может отличаться на 5–10 % из-за дефектов и нестехиометрии. Как это влияет на энергетические параметры (ΔH) и равновесные условия? В главе V при анализе механического разрушения используется прочность $\sigma \approx 1{,}5$–4 МПа (рис. 5.1.2), полученная из данных для льда, тогда как гидраты могут иметь существенно более низкую прочность из-за дефектов и включений. Как это влияет на критерий $\Delta P/\sigma > 1$?

- Основное внимание в диссертации уделено росту, фазовой устойчивости и диссоциации гидратов. Начальная стадия зарождения гидратной фазы, включая индукционный период, влияние межфазной границы и возможный эффект памяти, наблюдаемый в экспериментах по гидратообразованию, рассмотрена недостаточно полно. Учет этих факторов усилил бы связь разработанного аппарата с экспериментальными исследованиями неравновесного гидратообразования.

Положительный отзыв ведущей организации содержит следующие замечания и вопросы рекомендательного характера:

- В диссертации предложен обширный комплекс физико-математических моделей и расчетных зависимостей. При этом желательно четче разграничить универсальную часть разработанного аппарата, описывающую общие закономерности образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур, и частные специфические зависимости, параметры которых определяются по экспериментальным или справочным данным для конкретных гидратообразователей.

- В работе рассматриваются гидратообразователи, находящиеся в различных фазовых и термодинамических состояниях, включая газообразные, жидкие и сверхкритические состояния. Представляется полезным дополнительно акцентировать внимание на том, какие элементы модели сохраняют инвариантность при переходе между этими состояниями, а какие требуют изменения используемых термодинамических функций и параметров.

- Введенный автором параметр неравновесности является важным элементом описания распределения компонентов между гидратной и внешней фазами. Вместе с тем отмечаем, что в дальнейшем развитии работы было бы полезно подробнее рассмотреть возможные способы его экспериментальной идентификации.

- При описании термобарической диссоциации и механического разрушения гидратов в работе использованы механические критерии предельного состояния гидратной фазы. Важно подчеркнуть, что при переходе от модельного гидратного тела к реальным природным и техногенным гидратосодержащим средам необходимо учитывать дополнительные факторы: пористость, дисперсность, степень насыщения, морфологию гидратов и свойства вмещающей среды.

- Некоторые разделы диссертации перегружены расчетными коэффициентами и обозначениями. Для облегчения восприятия материала полезно было бы систематизировать обозначения, составить сводную таблицу или перечень основных параметров и шире

использовать графические схемы, иллюстрирующие взаимосвязь структурного, термодинамического, кинетического и механического блоков модели.

Положительный отзыв доктора технических наук, доцента, заведующего кафедрой «Теоретические основы теплотехники» ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» **Хайрутдинова Венера Фаилевича**. Имеются следующие вопросы и замечания:

- В работе рассмотрены различные режимы термобарической диссоциации гидратов, включая тепловое, депрессионное и комбинированное воздействие. С точки зрения практического использования результатов было бы полезно более явно указать характерные геометрические масштабы, для которых применимы полученные зависимости: размер гидратного тела, толщина гидратного или ледяного слоя, характерный размер частиц разрушенного гидрата.

- В автореферате приведены данные о высокой согласованности расчетных и экспериментальных результатов. Вместе с тем желательно было бы подробнее отразить, как распределяются отклонения в различных термобарических диапазонах, особенно вблизи квадрупольных точек и областей изменения агрегатного состояния гидратообразователя.

Положительный отзыв члена-корреспондента РАН, доктора химических наук, главного научного сотрудника лаборатории новых физико-химических проблем Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН **Мартынова Александра Германовича**. Имеются замечания:

- 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.

- 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.

Положительный отзыв доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника, заведующего лабораторией проблем распределения стабильных изотопов в живых системах Федерального исследовательского центра «Южный научный центр Российской академии наук» **Джимака Степана Сергеевича**. Имеется следующее 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.

Положительный отзыв доктора физико-математических наук, доцента, главного специалиста отдела развития информационных систем в мониторинге разработки месторождений филиала ООО «РН-ГИР» в г. Уфе – БашНИПИнефть **Чиглинцевой Ангелины Сергеевны**. Замечания:

- В третьем выводе указаны проценты расхождения (1,70 %, 1,96 %, 0,09 %). Здесь стоит пояснить, как они рассчитаны (среднее абсолютное отклонение, среднеквадратическая ошибка).

- Для модели распределения компонентов (вывод четвертый) и корреляционного подхода (вывод пятый) не приведены показатели точности (ошибки, диапазоны отклонений, сравнение с альтернативными моделями). Без этого сложно оценить практическую ценность полученных результатов.

- В седьмом выводе упоминаются «критерии термодинамической и термомеханической устойчивости», но не раскрыто, в чем именно они состоят (например, пороговые значения, условия потери устойчивости, форма критериев). Это позволило бы оценить новизну и применимость результатов.

- Предложение «Разработанный теоретический и расчетный аппарат послужил основой для технологических и технических решений, направленных на предупреждение и ликвидацию техногенных гидратов» слишком общее. Нужны конкретные примеры: какие именно решения, на каких объектах внедрены, какой эффект получен (экономия, снижение аварийности, рост добычи). Это бы определило еще большую практическую значимость работы в технологических процессах нефтегазовой отрасли.

Положительный отзыв доктора технических наук, главного научного сотрудника, заведующего отделом теплосиловых систем Института систем энергетики им. Л.А. Мелентьева СО РАН **Донского Игоря Геннадьевича**. Вопросы и замечания:

- На стр. 3 автор пишет, что статистико-термодинамическая модель строения соединений включения не учитывает кинетику и метастабильные состояния. Возникает вопрос: а должна ли термодинамическая модель описывать кинетические явления? Полагаю, что разные модели призваны описывать разные стороны явлений, и требовать универсальности от заведомо ограниченных моделей довольно странно. Сюда же можно отнести замечание на стр. 11 о том, что «большинство моделей строится на ряде приближений»: я полагаю, что все модели строятся на тех или иных приближениях.

- В работе упоминается «псевдосжиженное состояние»: полагаю, что термин введен автором. Считаю этот термин неудачным, поскольку «псевдоожижение» имеет сильные коннотации из химической технологии.

- Не до конца ясно, каким образом автором получены величины из табл. 1 и 2: вычислены исходя из теоретических положений? Получены в результате аппроксимации эмпирических данных? Если второе, то какой метод аппроксимации использовался? С чем связана высокая вариабельность коэффициента термоупругости в табл. 1 (на порядок величины для гидратов одного газа, в то время как остальные коэффициенты имеют одинаковый порядок даже для разных газов)?

- Верно ли, что в формулах (12) и (13) второе слагаемое линейно по температуре (не по разности температур)? Верно ли, что в уравнении (23) температуры складываются, а не осредняются, как в (24)? Каким образом выделяются диапазоны для формул (20)–(22)?

- Из каких соображений выбран вид релаксационной аппроксимации (33)? Каковы пределы применимости этой аппроксимации? Откуда можно вычислить скорость релаксации?

- Изложенная автором теория явления самоконсервации (стр. 33–35) вызывает сомнения. Есть ли экспериментальные данные, которые могут быть согласованно проинтерпретированы в рамках этих соображений?

- Из уравнений (52) и (53) можно сделать вывод, что диссоциация целого и разрушенного гидрата различается в механизме теплоотдачи. Полагаю, что скорее

теплоперенос в целом куске гидрата можно рассматривать как процесс теплопроводности, в то время как мелкие куски разрушенного гидрата будут иметь намного меньшее время тепловой релаксации и диссоциировать со скоростью внешней теплопередачи.

Помимо этого, автор довольно вольготно вводит новые термины («режимное описание гидратообразования», «фазовая кинетика»); некоторые обозначения не расшифрованы ($l_{м.п.}$ и $l_{б.п.}$ на стр. 15, W_b на стр. 35) или многократно используются для разных величин.

Положительный отзыв доктора физико-математических наук, доцента, заместителя директора по науке, заведующего Центром компьютерного моделирования неорганических и композитных наноразмерных материалов, ведущего научного сотрудника Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН **Квашнина Дмитрия Геннадьевича**. Имеются замечания:

- 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».

- 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.

Положительный отзыв доктора физико-математических наук, профессора кафедры теоретической физики и компьютерных технологий ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет» **Исаева Владислава Андреевича**. В отзыве нет замечаний.

Положительный отзыв доктора физико-математических наук, профессора, директора Тюменского филиала ФГБУН Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН **Мусакаева Наиля Габсалямовича** и кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника того же филиала **Бородина Станислава Леонидовича**. Замечания:

- Во второй главе автор пишет, что «...при формировании кристаллической решетки в полостях возникает локальное высокоплотное состояние включенного компонента...», при этом речь идет «...об эффективном локальном „псевдосжиженном“ состоянии включенной молекулы...». Такие выводы весьма нетривиальны и требуют, на наш взгляд, дополнительных обоснований.

- В третьей главе соискателем предлагается находить равновесную температуру гидратообразования многокомпонентных смесей в виде суммы равновесных температур гидратообразования составляющих, аддитивных по мольной доле компонентов в гидратной фазе. Но, например, модель Ван-дер-Ваальса–Платтеу определяет нелинейную зависимость равновесных значений температуры (при известном давлении) от состава компонентов в газогидрате. Автору следовало бы привести соответствующие оценки, которые бы показали допустимость предлагаемого подхода для расчета равновесной температуры гидратообразования многокомпонентных смесей.

- В автореферате представлены уравнения (17), (18) и (19) для трех различных диапазонов, а в таблице 2 приведены численные значения коэффициентов для этих уравнений. Вопрос следующий: на границах между первым и вторым диапазонами, а также между вторым и третьим диапазонами (в точках I и II на рисунке 2) совпадают ли значения

функций (17) и (18), а также (18) и (19), то есть являются ли полученные зависимости в совокупности непрерывными и однозначными или в указанных точках они дают различные значения? Это может быть критически важно для расчетов по приведенным зависимостям, если в них происходит переход между диапазонами (меняется расчетное уравнение).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты являются признанными специалистами в областях физики конденсированного состояния, теплофизики, механики многофазных систем, тепломассопереноса и физико-математического моделирования и имеют публикации в рецензируемых отечественных и зарубежных изданиях по направлениям, непосредственно связанным с тематикой диссертации. Специалисты ведущей организации обладают признанными научными компетенциями в области газовых гидратов, многофазных систем, тепло- и массопереноса, исследования и моделирования природных и техногенных гидратных процессов.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан согласованный комплекс физико-математических моделей и методов расчета процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II как каркасных конденсированных систем с упорядоченной структурой и включенной фазой, объединяющий молекулярно-структурный уровень (энергетические параметры включения молекул, формирование каркаса и заполнение полостей) с макроскопическими характеристиками фазового равновесия, кинетики, термобарических превращений и механической устойчивости;

предложены: физико-математическая модель образования гидратов газообразных и жидких гидратообразователей на основе принципа энергетического подобия с процессом включения молекул в полости водного каркаса; физическая интерпретация локального высокоплотного состояния молекул-гостей в гидратных полостях; допущение о возможности учета дополнительного вклада молекул воды в баланс заполнения полостей; корреляционный подход на основе введенных псевдокритических и приведенных параметров к описанию равновесных термобарических условий индивидуальных и многокомпонентных гидратных систем;

доказана применимость разработанного аппарата для расчета молекулярных, энергетических, структурных и равновесных характеристик гидратов в исследованных диапазонах, что подтверждено сопоставлением с опубликованными экспериментальными данными;

введены: параметр неравновесности, количественно характеризующий степень завершенности фазового превращения и связывающий скорость гидратообразования, тепло-/массоперенос и состав взаимодействующих фаз; псевдокритические и приведенные параметры гидратообразования, взвешенные по молярной поляризуемости компонентов; система безразмерных параметров и критериев для описания роста и диссоциации гидратной фазы в различных режимах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны в пределах принятых модельных допущений положения о возможности согласованного расчета энергетических, структурных и равновесных характеристик гидратов на основе энергетического подобия и учета заполнения полостей водного каркаса;

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс положений статистической физики, теории фазовых равновесий, неравновесной

термодинамики и механики разрушения, обеспечивающий согласованный переход от микроуровня и мезоскопического описания к макроскопическим характеристикам гидратной системы;

изложены положения: о гидратообразовании как многомасштабном фазовом превращении каркасной конденсированной системы с включенной фазой; о существенной роли заполнения полостей, энергетических факторов, кинетических ограничений и метастабильности в формировании наблюдаемых характеристик;

раскрыты особенности неравновесного распределения компонентов при конечной скорости превращения, влияния ограничений переноса на рост гидрата и метастабильной диссоциации;

изучены связи между температурой, давлением, составом, молярной поляризуемостью компонентов, режимами тепло-/массопереноса, степенью завершенности фазового превращения и механической целостностью гидратов;

проведена модернизация расчетных подходов к описанию фазовых состояний, состава и кинетики гидратных систем путем введения физически интерпретируемых параметров и объединения отдельных расчетных блоков в единую схему.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны расчетные методы определения равновесных термобарических условий гидратообразования, молекулярных и энергетических характеристик, состава гидратной фазы, кинетических параметров роста, условий устойчивости и количества диссоциирующего гидрата; результаты используются в производственной деятельности филиала «Ставропольское УПХГ» ООО «Газпром ПХГ», проектных подразделений ООО «НК „Роснефть“ – НТЦ», филиала «Краснодар бурение» ООО «Газпром бурение» и ООО «Гидронефтегаз», а также в образовательном процессе РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, Пермского национального исследовательского политехнического университета и Кубанского государственного университета;

определены перспективы практического применения разработанного аппарата для выбора безгидратных режимов эксплуатации скважин и газотранспортных систем, прогнозирования состава смешанных гидратов, оценки режимов синтеза и диссоциации, а также обоснования способов разрушения техногенных гидратных образований;

создана расчетная основа технологических и технических решений, защищенных 12 патентами Российской Федерации на изобретения;

представлены рекомендации по использованию разработанных зависимостей и методов при анализе гидратных систем, а также направления дальнейшего развития моделей с учетом дефектности, морфологии и размерных эффектов гидратной фазы.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория построена на известных положениях статистической физики, равновесной и неравновесной термодинамики, тепло-/массопереноса, механики разрушения и в исследованных областях согласуется с опубликованными экспериментальными данными;

идея базируется на энергетическом подобии процессов гидратообразования и адсорбционного включения молекул, а также на анализе значительного массива известных данных;

использованы сопоставления расчетных данных с опубликованными экспериментальными и справочными данными по молекулярным, энергетическим, структурным и равновесным параметрам гидратов;

установлена количественная согласованность расчетных и экспериментальных результатов в пределах заявленных диапазонов;

использованы методы статистической обработки опубликованных экспериментальных данных, сравнительной оценки методов определения констант Ленгмюра, корреляционного анализа по 21 гидратообразователю, аппроксимации равновесных зависимостей степенными, логарифмическими и полиномиальными функциями, графоаналитического анализа методом кругов Мора и оценки относительных отклонений расчетных равновесных температур от экспериментальных значений.

Личный вклад соискателя состоит в постановке научной проблемы и формулировке цели и задач исследования, разработке физико-математических моделей и расчетных зависимостей, выполнении расчетов, систематизации и интерпретации результатов, сопоставлении расчетных данных с экспериментальными и литературными сведениями, формулировке научных положений, выводов и рекомендаций, апробации результатов и подготовке основных публикаций. Основные теоретические результаты получены Н.А. Шостаком лично либо при его определяющем участии; использование в диссертации совместных результатов отражено ссылками на соответствующие публикации и на соавторов.

На заседании 06.11.2026 г. диссертационный совет принял решение присудить Шостаку Никите Андреевичу ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния за разработку теоретических положений, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области физики конденсированного состояния, состоящее в развитии согласованного многоуровневого описания клатратных гидратов кубических структур как каркасных конденсированных систем с включенной фазой и установлении связей между молекулярно-структурными параметрами гидратной решетки и макроскопическими характеристиками фазового равновесия, состава, кинетики, метастабильности, термобарической диссоциации и механической устойчивости.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 8 докторов наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 16 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 13, против – 0, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета _____ Ашхотов Олег Газизович

Ученый секретарь
диссертационного совета _____ Дышеков Артур Альбекович

Дата оформления заключения:
6 ноября 2026 г.