

ОТЗЫВ
на автореферат диссертации Новикова Артема Андреевича
«Термодинамическое моделирование водно-солевых систем на основе
ортофосфатов натрия и калия»,
представленной на соискание степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4 – физическая химия

Диссертационная работа Новикова А.А. посвящена термодинамическому моделированию таких важных с практической точки зрения объектов, как водно-солевые системы на основе ортофосфатов натрия и калия. Эти вещества широко применяются в быту и производстве в качестве минеральных удобрений, пищевых добавок, теплоаккумулирующих материалов, при очистке вод и переработке ядерных отходов, поэтому разрабатываемая комплексная модель такой системы, несомненно, будет востребована при оптимизации самых разных технологических процессов, в которых участвуют соли щелочных металлов и фосфорной кислоты.

Одним из главных достоинств работы является получение самосогласованного описания не только взаимной системы $\text{H}_2\text{O} - \text{H}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{H}_2\text{PO}_4^-, \text{HPO}_4^-, \text{PO}_4^{3-}$, но и 13 образующих ее подсистем в широком интервале температур и составов, что гарантирует корректность прогнозов термодинамических свойств фаз и фазовых равновесий при последующем развитии модели и расширении числа компонентов. Судя по всему, автором проанализировано большое число первоисточников по теме работы и проведен критический анализ данных. Отдельное внимание Новиков А.А. уделяет статистическим показателям разработанной им водно-солевой модели, анализируя распределение отклонений экспериментальных данных от расчётных значений. Такой подход нечасто встречается в современных работах, посвященных термодинамическому моделированию, и свидетельствует о высоком уровне профессиональной подготовки диссертанта.

Результаты работы прошли достаточную апробацию, они опубликованы в 4-х научных статьях рецензируемых научных изданий, которые индексируемы в базе ядра Российского индекса научного цитирования «eLibrary Science Index» и рекомендованы для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4 Физическая химия, а также доложены на российских и международных конференциях, что подтверждает их актуальность, научную и практическую значимость. Следует отметить, что в одной из статей Новиков А.А. является единственным автором, и это безусловно свидетельствует о его научной состоятельности.

К сожалению, в тексте автореферата имеется несколько опечаток:

1. Оригинальное уравнение состояния НКФ [1,2] было разработано для описания водных растворов ионов при *бесконечным* разбавлении, однако в

последствии Шок с соавт. [2] предложили обобщить его на нейтральные молекулы. (стр. 8)

2. Ортофосфорная кислота диссоциирует по трём *степеням*...(стр. 10)
3. Для растворов Na_2HPO_4 высокотемпературные данные о свойствах раствора *ограничен*. (стр. 19)

Также при прочтении автореферата возникло несколько вопросов:

1. Как на рис. 2 (стр. 16) проведена пунктирная линия, соответствующая метастабильному состоянию?
2. Насколько завышена энтропия испарения в уравнении Клаузиуса–Клапейрона для давления насыщенных паров H_3PO_4 (стр. 16)?
3. Возможно ли непосредственное использование такой сложной разработанной модели для технологических расчетов или все-таки потребуются какая-то дополнительная адаптация модельных представлений?

Указанные комментарии не влияют на положительную оценку работы в целом. На основании текста автореферата можно сделать вывод, что проведенные исследования (по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов) соответствуют папорту специальности 1.4.4 – Физическая химия и критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а автор диссертации – Новиков Артем Андреевич – достоин присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (химические науки).

с.н.с. лаборатории термодинамики неорганических материалов ИНХ СО РАН,
630055, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 3.
Тел. (383)3309259, e-mail: zelenina@niic.nsc.ru

к.х.н., доцент

Зеленина Л.Н.

25.11.2025

Подпись Зелениной Л.Н. заверяю.
Ученый секретарь ИНХ СО РАН
доктор химических наук

Герасько О.А.