

Заключение диссертационного совета МГУ.014.3
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
Решение диссертационного совета от «19» декабря 2025 г. №194

О присуждении Новикову Артему Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Термодинамическое моделирование водно-солевых систем на основе ортофосфатов натрия и калия» по специальности 1.4.4 Физическая химия принята к защите диссертационным советом 07.11.2025, протокол №190.

Соискатель Новиков Артем Андреевич 1995 года рождения, в 2025 году окончил очную аспирантуру химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Соискатель работает младшим научным сотрудником кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова в лаборатории химической термодинамики.

Диссертация выполнена в лаборатории химической термодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент Успенская Ирина Александровна, профессор кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

1. Тойкка Александр Матвеевич, доктор химических наук, профессор, ФГБОУ ВО Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, кафедра химической термодинамики и кинетики, заведующий кафедрой химической термодинамики и кинетики;

2. Киселев Михаил Григорьевич, доктор химических наук, профессор, ФГБУН Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, дирекция, директор института;

3. Путляев Валерий Иванович, кандидат химических наук, ФГБОУ ВО Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра неорганической химии, лаборатория неорганического материаловедения, доцент;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии, что подтверждается наличием публикаций в международных рецензируемых изданиях в соответствующей сфере исследования.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 работы, из них 4 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях,

рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук.

1. Новиков А. А. Применение расширенного уравнения состояния Хелгесона–Киркхама–Фловерса для сильнополярных недиссоциированных веществ: свойства мышьяковистой и ортофосфорной кислот при бесконечном разбавлении // Журнал физической химии. – 2022. – Т. 96. – № 12. – С. 1746–1758. (1.41 п. л., вклад Новикова А. А. 100%; Импакт-фактор 0.704 (РИНЦ); EDN: SMQBZT)
Novikov A. A. Applying the Extended Helgeson–Kirkham–Flowers Equation of State to Strongly Polar Undissociated Substances: Properties of Arsenous Acid and Orthophosphoric Acids at Infinite Dilution // Russian Journal of Physical Chemistry A – 2022 – Vol. 96 – № 12. – P. 2667–2679. (1.41 п. л., вклад Новикова А. А. 100%; Импакт-фактор 0.204 (SJR); EDN: XJWUZK)
2. Novikov A. A., Luo Y., Kurdakova S. V., Kovalenko N., Uspenskaya I. A. Thermodynamics of alkali metal orthophosphate water-salt systems. I. Dissociation constants and the $\text{H}_2\text{O} - \text{K}_3\text{PO}_4$ system: Experimental study and modeling // Journal of Molecular Liquids. – 2024. – Vol. 401. – P. 124614. (1.63 п. л., вклад Новикова А. А. 70%; Импакт-фактор 5.2 (JIF); EDN: RSKTJM)
3. Novikov A. A., Luo Y., Kurdakova S. V., Kovalenko N., Uspenskaya I. A. Thermodynamic Properties of $\text{H}_2\text{O}-\text{Na}_3\text{PO}_4$ and $\text{H}_2\text{O}-\text{Na}_3\text{PO}_4-\text{K}_3\text{PO}_4$ Systems: Experimental Study and Modeling // Journal of Chemical & Engineering Data. – 2025. – Vol. 70. – № 3. – P. 1215–1230. (1.79 п. л., вклад Новикова А. А. 70%; Импакт-фактор 2.1 (JIF); EDN: YSZXVO)
4. Novikov A. A., Kovalenko N., Uspenskaya I. A. Thermodynamic Modeling of the $\text{H}_2\text{O}-\text{Na}^+, \text{K}^+ \parallel \text{HPO}_4^{2-}, \text{PO}_4^{3-}$ System // Journal of Chemical & Engineering Data. – 2025. – Vol. 70. – № 9. – P. 3638–3655. (2.02 п. л., вклад Новикова А. А. 80%; Импакт-фактор 2.1 (JIF); DOI: 10.1021/acs.jced.5c00393)

На диссертацию и автореферат поступило 4 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена задача построения для многокомпонентной многофазной водно-солевой системы на основе ортофосфатов натрия и калия термодинамической

модели, необходимой в широком диапазоне составов и температур для научных и промышленных расчётов.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Уравнение состояния Хелгесона–Киркхама–Фловерса (УС НКФ) с предложенным набором параметров и модифицированным вкладом для полярных молекул обеспечивает корректное воспроизведение констант кислотности ортофосфорной кислоты по трём ступеням диссоциации и термодинамических свойств анионов H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} , PO_4^{3-} , а также недиссоциированной молекулы H_3PO_4^0 в бесконечно разбавленных водных растворах в широком диапазоне температур и давлений;
2. Для корректной экстраполяции констант кислотности ниже 230 К целесообразно использовать специально модифицированное уравнение состояния НКФ, построенное по адаптированному методу Тонера–Катлинга, в сочетании с моделями PC-SAFT и Путинцева–Путинцева для оценки свойств воды;
3. Предложенная термодинамическая модель, основанная на формализме Питцера–Симонсона–Клэгга в сочетании с модифицированным УС НКФ, воспроизводит термодинамические свойства жидкой фазы, а также все типы фазовых равновесий в системе $\text{H}_2\text{O} - \text{H}^+$, Na^+ , $\text{K}^+ \parallel \text{H}_2\text{PO}_4^-$, HPO_4^{2-} , PO_4^{3-} и её подсистемах в диапазоне от разбавленных до насыщенных растворов, от замерзания до кипения жидкой фазы при стандартном давлении.

На заседании 19.12.1995 диссертационный совет принял решение присудить Новикову А. А. ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4 Физическая химия (химические науки), участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета

Горюнков А. А.

Ученый секретарь

диссертационного совета

Шилина М. И.

19.12.2025