

О Т З Ы В

об автореферате диссертации **Новикова Артема Андреевича**
«ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОДНО-СОЛЕВЫХ
СИСТЕМ НА ОСНОВЕ ОРТОФОСФАТОВ НАТРИЯ И КАЛИЯ»,
представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4 – физическая химия

Диссертационная работа А.А.Новикова посвящена разработке комплексной термодинамической модели многокомпонентных водно-солевых систем с участием ортофосфатов натрия и калия. Создание такой модели, востребовано в химической технологии, материаловедении и смежных областях, Ортофосфаты широко применяются в промышленности, в частности, при производстве удобрений, пищевых добавок и теплоаккумулирующих материалов; задача создания отечественных инструментов надежного прогноза термодинамического поведения указанных систем в широком диапазоне условий **весьма актуальна**. Этим же определяется и **высокая практическая значимость** проведенного исследования: разработанная автором теоретическая модель и программное обеспечение позволяют рассчитывать ключевые термодинамические свойства и прогнозировать фазовые равновесия, что критически важно при оптимизации технологических процессов и создании новых материалов. Примечательно, что методология и программное обеспечение автора не ограничены системами с ортофосфатами натрия и калия, но применимы и для других сложных водно-солевых систем.

Научная новизна работы определяется тем, что для оценки свободной энергии сольватации, автором предложено изящное сочетание уравнения состояния Хелгесона-Киркхама-Фловерса с теорией диэлектриков Кирквуда, основанной на мультипольном разложении. Оригинальной идеей авторов является введение виртуальной величины давления насыщенных паров H_3PO_4 с целью количественного описания равновесия жидкость-пар водных растворов этой соли при повышенных температурах.

Для оценки параметров сформулированной в диссертации комплексной термодинамической модели разработано авторское программное обеспечение, в котором, кстати сказать, решена далеко не тривиальная вычислительная задача расчета фазовых равновесий. Автором проведена огромная сложная работа по оценке параметров модели и ее верификации по имеющимся экспериментальным данным, а также по

анализу и систематизации этих данных. При этом достигнутая автором высокая точность описания констант кислотности и целого набора термодинамических характеристик растворов ортофосфатов в огромном интервале температур и давлений (Рис. 3 и 4 автореферата) по истине впечатляет! Достоверность результатов и обоснованность выводов работы не вызывают сомнений.

Текст автореферата изложен ясно, сжато, хорошим языком. Статьи автора опубликованы в высокорейтинговых журналах и достаточно полно отражают содержание автореферата.

По автореферату имеются следующие замечания:

1. Отсутствие расшифровки целого ряда обозначений в приводимых в автореферате формулах замедляет восприятие текста.
2. Недостаточно подробно разъяснено предлагаемое автором новое уравнение (13); из текста автореферата остается неясным смысл параметра β и детали физической модели, описываемой этим уравнением.

Несмотря на сделанные замечания, считаю, что по актуальности, научной новизне, объему и практической значимости диссертационная работа Новикова Артема Андреевича соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а ее автор, Новиков Артем Андреевич, достоин присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия, профессор, профессор кафедры физической химии
ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»,
Университетская наб. 7/9, Санкт-Петербург,
199034 Российская Федерация

Викторов Алексей Исмаилович
Тел.
е-мейл:

20 ноября 2025



20.11.2025