

**ОТЗЫВ официального оппонента
о диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук Новикова Артема Андреевича
на тему: «Термодинамическое моделирование водно-солевых систем на
основе ортофосфатов натрия и калия» по специальности 1.4.4.
Физическая химия**

Диссертационная работа А.А. Новикова посвящена исследованию, на первый взгляд, достаточно узкого класса водно-солевых систем, но, фактически, ее содержание значительно шире. Действительно, сложные многокомпонентные системы, конкретный предмет диссертации, являются нетривиальным объектом как в экспериментальном, так и теоретико-расчетном отношении, и исследования подобных водно-солевых систем должны позволить найти новые пути физико-химического анализа, получить комплекс перспективных результатов, в том числе, в области моделирования термодинамических свойств. Содержание и итоги рецензируемой работы, безусловно, являются определенным развитием исследований, проводимых в лаборатории химической термодинамики МГУ им. М.В. Ломоносова под руководством проф. И.А. Успенской.

Вместе с тем, **актуальность** работы не ограничена чисто научной стороной, и именно это подчеркивает автор, указывая на применение ортофосфатов натрия и калия в различных практических, промышленных областях. Оптимизация технологических схем всегда требует включения в их анализ методов моделирования, в данном случае – совокупности термодинамических свойств. Наконец, развитие отечественных методов моделирования необходимо и в связи с известными современными проблемами доступа к коммерческим международным пакетам.

Одним из результатов диссертации, который непосредственно связан с указанной выше сложностью объектов исследования, характеризует их новизну, это попытка, и вполне удачная, предложить комплексное описание, далее – комплексную модель водно-солевой системы, базирующуюся, с одной стороны, на анализе существующих подходов (модель Питцера и ее

развитие, Helgeson–Kirkham–Flowers EoS и другие), с другой стороны, на выработанном автором алгоритме последовательного построения модели с учетом многообразия свойств входящих в рассматриваемую систему компонентов и подсистем. С точки зрения оппонента, это (детальный и аккуратный подход автора), в первую очередь, определил как успех исследования, так и его безусловную **новизну**.

Обоснованность и достоверность выводов также непосредственно связана с методологией исследования, которой придерживается автор. Прежде всего, можно отметить, что при разработке предлагаемой модели анализировался, по-видимому, максимально возможный комплекс разных подходов, например, касающихся приближений, используемых разными авторами для расчета химических равновесий. В тексте неоднократно подчеркивается необходимость применения определенных приближений, например, при моделировании поведения системы ортофосфорная кислота – вода, с обязательной оценкой возможности, недостатков и преимуществ того или иного допущения. Таким образом, автор вновь демонстрирует **обоснованность** предлагаемого подхода к моделированию и, одновременно, **научный уровень** самого диссертанта. Подобных примеров тщательного отношения к исследованию можно привести достаточно много (например, сравнительный анализ модели Борна и подхода Кирквуда при описании сольватации), и все они являются выигрышными для оценки диссертации в целом.

В этом же контексте можно отметить раздел «5.3 Статистические показатели модели водно-солевой системы», содержание которого дополнительно обосновывает гибкость и надежность предлагаемой модели.

В Разделе 5 (Обсуждение результатов) достаточно детально продемонстрированы возможности модели, ее адекватность при применении к ряду систем, что также отражает достоверность результатов диссертации и обоснованность выбранного автором подхода.

Выводы и Заключение в достаточной степени соответствуют основным результатам диссертационного исследования, отражают ее содержание и **значимость**. Помимо основного текста диссертации (186 страниц) в нее включены Приложения, содержащие дополнительные сведения, такие как представление использованных моделей, ряд численных данных. В списке литературы приведены ссылки на 461 публикацию. Общий объем работы: 227 страниц, 50 рисунков, 31 таблица. Работа поддержана грантами РФФИ и РНФ. Материалы диссертации опубликованы в четырех статьях в журналах, индексируемых в базах Web of Science и Scopus, представлены на четырех конференциях разного уровня.

В целом результаты работы А.А. Новикова можно охарактеризовать как успешное развитие методов моделирования физико-химических свойств сложных многокомпонентных систем. Особую значимость работа, конкретно ориентированная на водно-солевые системы должна иметь и в практическом отношении, в галургических производствах.

Несмотря на очевидную положительную оценку диссертации и отмеченную тщательность, обоснованность и аргументированность проведенного исследования, текст работы вызывает некоторые вопросы и критические комментарии. С точки зрения оппонента они, преимущественно, связаны с рядом стилистических погрешностей при изложении материала. Ниже приведены избранные вопросы и замечания.

1. По-видимому, приводимые итоговые соотношения для модели (Приложение Б) потребуют их дополнительной адаптации для практических целей. Как автор оценивает возможности их применения, какие вычислительные ресурсы должны быть привлечены?

2. Насколько необходимо для модельных расчетов применение эмпирического уравнения (154) для зависимости давления пара воды от температуры с шестью коэффициентами (с 9 значащими цифрами)?

3. На стр. 75 автор пишет: «для упрощения анализа было решено учитывать калорические данные только в двухкомпонентных подсистемах».

Наверное, следовало указать, к чему, каким неточностям приводит это допущение.

4. В разделе 5.1.2 при экстраполяции данных о первой константе кислотности на низкие температуры «процедуру апробации проводили на серной кислоте» (стр. 105). Насколько корректна такая апробация, если объектом является ортофосфорная кислота?

5. Как уже указано выше, в тексте достаточно много стилистических погрешностей при изложении материалов работы (то, что называют «научным сленгом»). Например, стр. 11: «Теплоёмкость жидкой H_3PO_4 была получена из данных..». Или, стр. 64: «уход энергии Гиббса в бесконечность». А также (стр. 106): «уравнение НКФ уходит в бесконечность». Кроме того, обилие символов, по-видимому, требует отдельного раздела с их расшифровкой: это облегчило бы чтение диссертации.

6. На стр. 141-142 автор указывает на «недостаток надежных экспериментальных измерений». При этом указывается и на конкретные эксперименты, необходимые для «уточнения параметров модели и повышения ее точности». Конечно, объем работы достаточен для диссертационного исследования, но возникает вопрос: проводил ли сам автор какие-либо эксперименты (возможно, не отраженные в тексте диссертации)?

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Содержание автореферата соответствует диссертации. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия (по химическим наукам), направлению 2 «Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение термодинамических аспектов фазовых превращений и фазовых переходов», а также критериям, определенным п.п. 2.1-2.5 Положения о

присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова. Диссертационное исследование оформлено согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель, Артем Андреевич Новиков, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Официальный оппонент:

Доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой химической термодинамики и кинетики
Института Химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»

Тойкка Александр Матвеевич

20 ноября 2025 г.

Контактные данные:

тел.: +7(904)3304694, e-mail: a.toikka@spbu.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация:

02.00.04 – Физическая химия

Адрес места работы:

198504, г. Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, д. 26, Институт Химии, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет"

Тел.: +7(812)4284052; e-mail: a.toikka@spbu.ru

Подпись сотрудника Института Химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» профессора Тойкка Александра Матвеевича удостоверяю:

И.о. на
отдела
И.И. Кон

Документ подготовлен
в порядке исполнения
трудовых обязанностей

Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/secret.htm>