

ОТЗЫВ

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

Термодинамическое моделирование является одним из необходимых этапов исследования технологических и природных систем и процессов. Представленная работа Новикова А.А. посвящена термодинамическому моделированию в широком интервале температур и концентраций водных растворов ортофосфатов натрия и калия - важных для химической промышленности соединений.

Исследование выполнено на высоком методологическом уровне – разработана комплексная термодинамическая модель, справедливая в интервале температур от замерзания до кипения растворов при атмосферном давлении, успешно воспроизводящая фазовые равновесия жидкость – газ и жидкость – твердые фазы, а также активности компонентов и рН растворов. Для описания стандартных (т.е. при бесконечном разбавлении в воде) термодинамических свойств компонентов водного раствора использована модель НКФ, а для расчета коэффициентов активности и активности воды – подход Питцера – Саймонсона – Клегга. Разработанная диссертантом термодинамическая модель определяет практическую значимость работы.

Заметим, что дополнительные сложности в выполнении исследования вызваны необходимостью расчетов при весьма низких температурах – до 190 К, что привело к необходимости разработки методов экстраполяции стандартных термодинамических свойств водных соединений в область метастабильной воды, что является нетривиальной проблемой.

Особо следует отметить работу диссертанта по модификации модели НКФ в ее приложении к нейтральным по заряду частицам раствора. В

настоящее время модель НКФ - практически единственный инструмент расчета стандартных термодинамических свойств соединений водного раствора в весьма широком интервале температур и давлений, включая сверхкритическую область. Проблемы, возникающие при использовании модели НКФ (по существу это уравнение Борна с дополнительными вкладами) для описания термодинамических свойств незаряженных молекул были известны более 30 лет назад, были и неформальные обсуждения ситуации и даже звучали слова «уравнение Онзагера», но реально ничего не было сделано до Артема Андреевича Новикова, который не только использовал теоретически корректные соотношения для сольватации диполей в воде, но и сумел при этом сохранить общую структуру модели НКФ. И в данном вопросе, и в целом, сильной стороной соискателя является стремление опираться на теорию всюду, где это возможно.

К числу недостатков относится отсутствие в автореферате определения экспоненты β в уравнениях (13)-(16). Кроме того, из рассмотрения исключены процессы димеризации и дальнейшей полимеризации, особенно характерные для водных растворов дигидрофосфатов натрия и калия, скорее всего потому, что их учет привел бы к весьма существенному увеличению размерности регрессионной задачи.

Заключение

Исходя из содержания автореферата, диссертационная работа Новикова Артема Андреевича на тему «Термодинамическое моделирование водно-солевых систем на основе ортофосфатов натрия и калия» по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов отвечает критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», и ее автор

Новиков Артем Андреевич достоин присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Плясунов Андрей Валентинович

Кандидат химических наук

119991, Россия, г. Москва, ул. Косыгина, дом 19

Тел.: +7-499-137-58-37

Электр. почта: plyasunov@geokhi.ru

ФГБУН Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского
Российской академии наук (ГЕОХИ РАН)

Ведущий научный сотрудник

Лаб. моделирования гидрогеохимических и гидротермальных процессов

27 ноября 2025 г.

Подпись Плясунова А.В. удостоверяю:

Плясунов Андрей Валентинович
Манджарский Н.В.
ГЕОХИ РАН