

Отзыв официального оппонента
на диссертацию Апфельбаума Евгения Михайловича
«Законы подобия на основе идеальных линий и теплофизические свойства
веществ на фазовой диаграмме жидкостей»,
представленную на соискание учёной степени доктора физико-математических
наук
по специальности 1.3.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника

Диссертация Евгения Михайловича Апфельбаума посвящена глубокому анализу большого массива термодинамических данных для жидкостей, газов, сверхкритических флюидов и плазмы с целью выделения неких общих закономерностей, выполняющихся для различных веществ, а также расчёту теплофизических свойств низкотемпературной плазмы металлов.

Методы измерений и расчёта различных теплофизических свойств существуют уже давно, и с их помощью накоплен весьма значительный объём данных для различных газов и жидкостей. Однако остаётся ещё целый ряд веществ, для которых эти свойства, например, линии сосуществования жидкость-газ, всё ещё недоступны из измерений. К таковым относятся практически все металлы, для которых как двухфазная область, так закритический флюид располагаются при слишком высоких температурах. Наиболее строгие и продвинутое численные методы тоже пока не могут решить эту проблему для этих же веществ. Поэтому поиск общих закономерностей, известных как законы подобия, и использование более простых подходов для расчёта теплофизических свойств является **актуальной задачей**.

Новые полученные в диссертации законы подобия и вносят существенный вклад в развитие общих методов расчёта фазовых диаграмм различных систем, а также расчёта теплофизических свойств веществ. В работе предложен ряд математических соотношений для характеристических точек любой реальной и модельной системы и с их помощью выведено общее интерполяционное уравнение для линии существования жидкость-газ. Кроме этого, построена численная программа и рассчитаны термодинамические и транспортные свойства, т.е. электронные коэффициенты переноса, низкотемпературной плазмы целого ряда металлов. Для практического использования этих свойств в макроскопических задачах были разработаны простые полиномиальные аппроксимации, представленные в приложениях данной диссертации. Всё это определяет **теоретическое и практическое значение** полученных в диссертации результатов.

Научная новизна полученных в диссертации результатов заключается в следующем:

- Для существовавших идеальных линий были подтверждены старые и найдены *новые* законы подобия. Кроме этого, были также найдены и *новые* идеальные линии, для которых выполняются эти законы. Для этого был проанализирован огромный объём экспериментальных данных для 150 веществ, для которых *впервые* были построены их фазовые диаграммы с этими линиями.

- *Впервые* была рассмотрена и решена задача об области применимости полученных законов подобия. Для этого изучались многочисленные модельные 2D и 3D системы с известными потенциалами взаимодействия, что позволило применить численное моделирование и *впервые* установить связь между формой идеальных линий и функциональной формой потенциала взаимодействия.

- Было построено *новое* интерполяционное уравнение для кривой сосуществования жидкость-газ и разработан *новый* метод оценки координат критических точек и положения кривой сосуществования для произвольной системы, который применялся далее для металлов, для которых эти данные пока ещё недоступны из измерений.

- На основе общих подходов построена *новая* модель расчёта теплофизических свойств (термодинамических и транспортных) для низкотемпературной плазмы металлов и полупроводников, для которой установлена область её корректной применимости. При этом для ряда металлов, а именно серебра, галлия, углерода, свинца, висмута и индия эти свойства были рассчитаны и получены в рассматриваемой области *впервые*.

- *Впервые* с помощью разработанной ранее модели и аналитических разложений было найдено геометрическое подобие для линии единичного фактора сжимаемости в области низкотемпературной плазмы металлов, хотя и более слабым, чем его аналог для однокомпонентных систем и веществ.

Достоверность и обоснованность положений результатов диссертации и полученных в ней результатов подтверждается сравнением с имеющимися данными измерений и расчётов других авторов. Это сравнение показало хорошее согласие результатов данной диссертации с наиболее точными данными измерений. Например, кривые сосуществования, построенные по интерполяционному уравнению, представленному в работе отклоняется от экспериментальных данных не более чем на 5 % во всём диапазоне температур для огромного массива газов и жидкостей. Кроме этого, все результаты, представленные в диссертации опубликованы в рецензируемых авторитетных научных журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемые системами Web of Science и Scopus, и доложены на множестве научных конференций.

Объём и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и трёх приложений. В списке литературы 372 наименования.

Во введении обосновывается актуальность работы. Формулируются цели и задачи исследования и положения, выносимые на защиту.

Первая глава работы посвящена описанию идеальных линий жидкостей и законов подобия на основе этих линий. В этой главе вводится понятие идеальных линий – линий на фазовой диаграмме, на которых те или иные величины имеют значения, совпадающие с таковыми для идеального газа. Особое внимание уделено линии Зено, на которой давление рассматриваемой жидкости совпадает с давлением идеального газа. Обсуждается асимптотика этой линии в пределе низких температур. Показывается, что такая же идеальная линия может существовать и в кристалле.

Вторая глава посвящена изучению идеальных линий в модельных системах. Преимуществом модельных систем является то, что в рамках моделей можно провести очень точные вычисления. Это позволяет получить важные результаты, связывающие поведение идеальных линий с видом взаимодействия частиц. В работе рассмотрено несколько модельных систем: потенциалы Ми и прямоугольной ямы с различными параметрами взаимодействия, потенциал Леннарда-Джонса. Изучаются как трёхмерные, так и двумерные системы. Интересно отметить, что несмотря на сходный вид взаимодействия результаты для потенциала Ми и потенциала прямоугольной ямы оказываются в некоторых аспектах качественно различными. На основе полученных результатов строится модель, аппроксимирующая кривую кипения в широком интервале температур. Показывается, что применение этой модели позволяет получить хорошую аппроксимацию кривой кипения даже при использовании крайне ограниченного набора экспериментальных данных.

В третьей главе обсуждаются идеальные линии жидких металлов и полупроводников. Крайне важным фактом является то, что у металлов и полупроводников очень высокие критические температуры, поэтому их кривые кипения известны плохо. Основываясь на полученных ранее для модельных систем представлениях об идеальных линиях Е.М. Апфельбаум строит аппроксимации кривых кипения и делает оценки критических точек. Ввиду того, что данные разных экспериментальных публикаций для критических точек металлов расходятся порой на тысячи Кельвин, подобные теоретические оценки имеют крайне высокую ценность. При этом разработанные методы позволяют работать с совершенно разными с точки зрения химии веществами: щелочными металлами, щелочноземельными, алюминием, молекулярными парами серы и др.

В четвёртой главе обсуждаются теплофизические свойства низкотемпературной плазмы. Строится новая химическая модель и на её основе производятся расчёты электропроводности, теплопроводности и термоэдс плазмы большого количества веществ: бора, кремния, железа никеля и др. Полученные результаты, где это возможно, сравниваются с экспериментальными данными и данными первопринципного моделирования, а также с другими теоретическими моделями (модель среднего атома, модель Томаса-Ферми, модель COMPTRA). Следует отметить, что в этой области исследований трудно найти надёжные экспериментальные данные. Первопринципное моделирование тоже работает в требуемой области температур с большими натяжками. Поэтому модели строятся во многом «вслепую», без возможности верификации посредством сравнения с экспериментальными данными. Это хорошо видно из приведённых в диссертации графиков. При этом видно, что предлагаемая модель описывает экспериментальные данные и данные из моделирования не хуже, а в некоторых случаях лучше, чем другие теоретические модели.

Диссертационная работа Евгения Михайловича Апфельбаума выполнена на высоком уровне. Она представляет законченное научное исследование, в котором приводится решение крупной научной задачи: построены модели,

позволяющие описать большое количество теплофизических процессов в веществах различной природы: модельных системах, металлах, полупроводниках и в плазменном состоянии вещества.

Несмотря на общий высокий уровень работы, к ней имеется ряд замечаний:

1. В диссертации несколько раз встречается утверждение, что в пределе нулевой температуры линия Зено является касательной к жидкой ветви бинодали газ-жидкость. Следует отметить, что кривая кипения завершается в тройной точке, и не доходит до нулевой температуры. Поэтому имеет смысл говорить не о «бинодали в пределе низких температур», а о некоей экстраполяции бинодали к низким температурам. Следовало бы в явном виде привести, каким образом проводилась эта экстраполяция.
2. В подписи к рис. 1.4 употребляются очень общие выражения, которые не позволяют понять, что именно изображено на рисунке. Например, данные, обозначенные цифрой 7, соответствуют данным для органических веществ. Так как к органическим веществам относится огромное количество веществ с совершенно разными свойствами, следовало бы привести, какие именно органические вещества использовались в работе.
3. На странице 51 приводятся рассуждения автора о причинах нарушения соотношений подобия для некоторых систем (10 из 150-ти исследованных). При этом упоминается, что для воды и тяжёлой воды никаких объяснений нет, кроме эмпирического факта, что для воды нарушаются все известные соотношения подобия. Следует отметить, что есть ряд систем, демонстрирующих аномальное поведение, похожее на аномальное поведение воды: жидкие теллур и кремний, расплав Se-Te и др. Автор не упоминает, были ли попытки построения соотношений подобия для этих систем с целью сравнения их со случаем воды.
4. На рисунках с результатами для потенциала Ми буква n обозначает числовую плотность системы. В тоже время n является одним из параметров этого потенциала (уравнение (2.8)). Такое перекрытие обозначений создаёт некоторую путаницу.
5. В третьей главе приводятся кривые кипения и идеальные линии для большого количества веществ. При этом нет единого стиля оформления графиков: на некоторых графиках по оси X изображена плотность, а по Y – температура, а на некоторых наоборот. На некоторых графиках температура приводится в линейных координатах, а на других - в логарифмических. Отсутствие единого стиля в оформлении графиков затрудняет чтение работы.
6. В параграфе 3.7 обсуждаются кривая кипения и идеальные линии серы. При этом упоминается, что газообразная сера состоит из кластеров, причём размеры кластеров (число частиц в них) могут меняться в зависимости от температуры. Следовало бы подробнее объяснить

возможность применения законов подобия к системе с переменным составом.

7. На рис. 4.9 ряд кривых демонстрирует практически вертикальные скачки. Следовало бы привести объяснения причин этих скачков. Являются ли они индикаторами фазовых переходов в системе?

Указанные замечания не являются существенными и не снижают общую высокую оценку работы, которая представляет собой научное исследование, существенно углубляющее понимание теплофизических свойств различных фаз вещества. Решена важная научная задача – построение идеальных линий большого количества систем и установление их универсального характера. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор Апфельбаум Евгений Михайлович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника.

Отзыв составил:

в.н.с. лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах ИФВД РАН

д.ф.-м.н.

Фомин Юрий Дмитриевич

05.02.2024

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, д. 14, тел.: (495) 851-0582, hppi.troitsk.ru, e-mail: fomin314@mail.ru

Отзыв заверил:

Учёный секретарь ИФВД РАН

К.ф.-м.н.,

Валянская Татьяна Валентиновна

e-mail: tval@hppi.troitsk.ru



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.В. Верещагина Российской Академии Наук (108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, д. 14, тел.: (495) 851-0582, Сайт: <http://www.hppi.troitsk.ru>. E-mail: hpp@hppi.troitsk.ru)