

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу 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.

Теплофизические свойства веществ играют важную роль в самых разных отраслях знаний – как прикладных, так и фундаментальных. Благодаря появлению новых и развитию традиционных методов экспериментального исследования, быстро растёт объём накопленных фактических данных об этих свойствах. В то же время, отсутствует единая теоретическая методика, которая позволила бы достаточно надёжно и точно описать всё многообразие этих свойств в разных физических условиях согласно экспериментальным данным и предсказать их для тех веществ и при тех физических условиях, для которых надёжные экспериментальные данные отсутствуют. Расчёты из первых принципов (*ab initio*) в большинстве интересных случаев требуют настолько значительных вычислительных ресурсов, что становятся практически неосуществимыми без дополнительных предположений и упрощений, которые существенно ограничивают область их применимости и подчас ставят под вопрос адекватность полученных результатов. Поэтому весьма **актуальной задачей** остаётся развитие приближённых методов, таких как методы подобия и химические модели, чему и посвящена рассматриваемая диссертационная работа.

В диссертации Е.М. Апфельбаума, во-первых, изучены идеальные линии на фазовой плоскости и их соотношения подобия для широкого круга веществ, а во-вторых, разработан усовершенствованный метод расчёта термодинамических свойств и электронных коэффициентов переноса низкотемпературной нерелятивистской плазмы металлов и полупроводников на основе химического подхода и приближения времени релаксации. Полученные результаты имеют важное научное и прикладное значение. Найденные законы подобия для идеальных линий, разработанное автором уравнение бинодали и методика определения положения критических точек могут сравнительно просто применяться для тех веществ и физических условий, для которых отсутствуют экспериментальные данные или строгие расчёты – в частности, это относится к ряду тугоплавких металлов в области плавления. Это может быть весьма полезно при разработке новых технологий и планировании экспериментов. Развитый в диссертации метод расчёта степени ионизации, уравнения состояния и электронных коэффициентов

переноса низкотемпературной плазмы металлов и полупроводников на основе химической модели удобен для применения и восполняет существовавший пробел в области неполной ионизации, где ранее отсутствовали достаточно простые и в то же время надёжные методы подобных расчётов. Таким образом, представленные в диссертации результаты имеют важное **практическое значение**.

Научная новизна полученных в диссертации результатов заключается в следующем: найдены новые идеальные линии и новые законы подобия на фазовой диаграмме для различных веществ и установлена область их применимости; предложен новый метод построения бинодали жидкость-газ, основанный на законах подобия, и с его помощью построены бинодали для металлов в той области фазовой диаграммы, где они недоступны из экспериментов; построена химическая модель для расчёта термодинамических свойств и ионного состава низкотемпературной плазмы металлов и полупроводников, включая область неполной ионизации; существенно усовершенствован метод расчёта электронных коэффициентов переноса в приближении времени релаксации; на основе разработанных новых методов впервые рассчитаны термодинамические свойства, ионный состав и электронные коэффициенты переноса для ряда веществ, для которых ранее они были неизвестны в рассматриваемой области фазовой плоскости.

Достоверность и обоснованность научных положений диссертации вытекает из корректного использования современных методов теоретической физики и подтверждается сравнением полученных результатов с теоретическими работами и имеющимися экспериментальными исследованиями других авторов для тех веществ и тех физических условий, для которых соответствующие теоретические или экспериментальные результаты были известны ранее.

Диссертация имеет достаточный **объём** для изложения представленного материала и понятную **структуру**. Она состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и трёх приложений. Полный объём диссертации составляет 296 страниц; работа содержит 118 рисунков, 43 таблицы и библиографический список ссылок из 372 источников.

Введение знакомит читателя с основными целями и задачами работы, обосновывает актуальность исследуемой темы, её теоретическую и практическую значимость, содержит описание выбранных методов исследования, а также положения, выносимые на защиту, и сведения об апробации работы.

Первая глава содержит обзор литературных источников, а также определения основных терминов и понятий, используемых далее в тексте диссертации. Сформулировано понятие соотношений подобия, дан обзор их развития и современного состояния. Автор уделяет значительное внимание геометрическим соотношениям подобия, заключающимся в том, что определённые линии на фазовой плоскости сохраняют свою форму для самых разных веществ.

Достаточно подробно описаны связанные с ними закономерности и их практические следствия. Большое внимание уделено обсуждению универсальности линии единичной сжимаемости $Z = 1$. Показано, что она сохраняет свою прямолинейную форму не только для идеальных систем, описываемых уравнением Ван-дер-Ваальса или простыми потенциалами межчастичного взаимодействия, но и для подавляющего большинства реальных газов и жидкостей, информация о которых представлена в базе данных Национального института стандартов и технологий США (NIST). Представлены и обсуждены также найденные автором универсальные соотношения между критическими параметрами жидкостей и параметрами Бойля, а также теплотой испарения. Далее в первой главе рассматриваются и обсуждаются непрямолинейные идеальные линии и описывающие их уравнения, в том числе, найденные автором.

Вторая глава посвящена рассмотрению модельных систем с парно-аддитивными потенциалами межчастичного взаимодействия с целью установления связи между формой идеальных линий и моделью потенциала. Показано, что универсальная форма идеальных линий сохраняется в области применимости вириального разложения, и описаны закономерности поведения этих линий в той области, где его применимость нарушается. Далее во второй главе описывается и обсуждается построенное автором интерполяционное уравнение, описывающее обе ветви бинодали жидкость-газ на фазовой плоскости. Путём тестирования на базе данных NIST продемонстрирована хорошая точность этого уравнения. На этой основе предложен эффективный метод нахождения критических точек металлов, которые пока не могут быть измерены или рассчитаны более точными методами.

В третьей главе описывается методика и результаты применения рассматриваемых соотношений подобия для металлов. Их особенности связаны с тем, что, в отличие от простых газов и жидкостей, металл не может рассматриваться как однокомпонентная система. Описаны доступные экспериментальные данные, а также методы теоретического описания жидких металлов: метод псевдопотенциала и модель погружённого атома. На их основе выполнено моделирование методом Монте-Карло, с помощью которого показано, что в области жидкости линия $Z = 1$ тоже оказывается прямой, что позволяет определить бойлевские параметры путём экстраполяции. Применение разработанной процедуры к реальным жидким металлам, для которых имеются соответствующие экспериментальные данные, показало, что найденное автором уравнение бинодали для большинства из них сохраняет приемлемую точность. Этот метод, таким образом, позволяет оценить положение бинодали для тех металлов, для которых подходящие экспериментальные данные отсутствуют, что и было сделано автором в ряде примеров.

В четвёртой главе рассмотрены теплофизические свойства металлов и полупроводников. Эта глава наиболее объёмна. Подчёркивается принципиальная важность кулоновской составляющей взаимодействия. Разработана химическая модель, в которой учтены вклады в свободную энергию от электронов, атомов и различных ионов, а также от их взаимодействий друг с другом. Определена область корректного применения построенной модели. Затем эта модель последовательно и систематически применяется для плазмы из разных химических элементов. В тех случаях, для которых имеются подходящие экспериментальные данные либо данные расчётов из первых принципов, продемонстрирована хорошая точность разработанной модели в её области применимости. В тех случаях, где такие экспериментальные и расчётные данные отсутствуют, применение построенной модели позволило автору рассчитать теплофизические свойства веществ, которые ранее не были известны.

Заключение содержит достаточно подробное описание полученных результатов с указанием степени проработанности каждой из поставленных задач, обоснование их актуальности и достоверности полученных результатов, а также список актуальных нерешённых задач, перспективных для дальнейшего развития представленной тематики.

В Приложении А даны параметры критической точки, бойлевские параметры и соотношения между ними для различных газов и жидкостей. В Приложениях Б и В представлены аппроксимационные формулы для практического применения к расчётам теплофизических свойств висмута и индия.

В целом, в диссертации представлен большой объём исследований, основанных на тщательной разработке теоретических методик. При этом к изложению материала можно сделать следующие **замечания**.

1. Не указано, по какому малому параметру ведётся разложение (4.1). Также не указано, что в написанном виде оно, как представляется, справедливо только при условии малости произведения λk , и ничего не сказано о том, откуда берутся численные коэффициенты a и b .

2. На странице 140 используется, но не определена величина P_{ideal} . Очевидно, что по смыслу – это давление идеального газа nT , но в условиях частичной ионизации требуется уточнить, чему в этом выражении равна полная концентрация частиц n . Было бы также полезно охарактеризовать область применимости выражения (4.6) – в частности, упомянуть ограничение снизу на температуру T , которое, как представляется, необходимо для справедливости этой формулы.

3. В формуле (4.9) вызывает недоумение обозначение $O(1/2)$, которое в строго математическом смысле не отличается от $O(1)$. Наверное, здесь имеется в виду приближённое равенство “ $\approx 1/2$ ”?

4. На стр. 147 утверждение «Недостатком приближения Дебая – Хюккеля ... является то, что поправка к давлению в нём всегда отрицательна», неаккуратно, как и привязка к нему вывода о неприменимости этого приближения при больших значениях параметра кулоновской связи γ . На самом деле формула Дебая – Хюккеля в силу самого характера своего вывода предполагает малость параметра γ , а при этом условии отрицательная поправка к давлению не является недостатком.

5. На стр. 154 неправильной является отсылка к числу электронов у атома никеля в качестве обоснования того, почему изолированный атом нельзя рассматривать как статистическую систему. Статистическая сумма высоколежащих уровней расходится для атома со сколь угодно большим числом электронов. Устранение расходимости возможно путём учёта взаимодействий между атомами, ионами и электронами. Даже для атома водорода H, имеющего только один электрон, статистическая сумма, расходимость которой разумным образом обрывается за счёт учёта взаимодействий, будучи подставлена в уравнение Саха, правильно описывает относительное обилие всех тех состояний, которые не слишком возмущены этими взаимодействиями, а они при определённых условиях могут быть и высоколежащими (например, в разреженном межзвёздном газе, где взаимодействия слабы, наблюдаются состояния H с главным квантовым числом, достигающим до нескольких сотен).

6. При обсуждении роли электрон-электронного рассеяния для электронных коэффициентов переноса на стр. 161 не отражён значительный прогресс, достигнутый в понимании этой проблемы за последние годы (Shaffer & Starrett, Phys. Rev. E, 101, 053204 (2020) и ссылки там). Здесь также стоило бы отметить существенное различие в том влиянии, которое электрон-электронные столкновения оказывают на электропроводность и на теплопроводность плазмы.

7. Утверждение, что рецепт Планка – Ларкина для обрезания статистической суммы является «наиболее строго теоретически обоснованным», сопровождается утверждением, что он ведёт к неправильным заселённостям верхних уровней, что у неискущённого читателя может вызвать недоумение. Взаимно непротиворечивыми эти два утверждения могло бы сделать пояснение, что рецепт Планка – Ларкина строго обоснован только при том условии, что наряду с модификацией статистической суммы связанных состояний производится и соответствующая модификация вклада состояний непрерывного спектра в свободную энергию, а она на практике часто игнорируется. Этот чисто математический приём устранения расходимости не решает физической проблемы разрушения связанных состояний взаимодействиями с соседними частицами, то есть ионизации давлением. Это видно уже из того, что в формуле Планка – Ларкина отсутствует плотность. Именно поэтому при построении химической модели рецепт Планка – Ларкина, как правило, уступает другим способам обрезания

статистической суммы, также упомянутым в диссертации. Обсуждение этих проблем активно велось в 1980-е годы (например, F.J. Rogers, *Astrophys. J.*, 310, 723 (1986); W. Däppen et al., *Astrophys. J.*, 319, 195 (1987)). На практике в тех случаях, когда способ устранения расходимости статистической суммы может иметь значение, часто используется метод вероятностей заполнения (например, Hummer & Mihalas, *Astrophys. J.*, 331, 794 (1988)), актуальность которого подтверждается и недавними работами (например, Colgan et al., *Astrophys. J.*, 817, 116 (2016)), или метод эффективного понижения потенциала ионизации (например, Crowley, *HEDP*, 13, 84 (2014)). Однако при сравнительно невысоких температурах и не слишком низких концентрациях, когда вклад высоколежащих уровней не важен, способ устранения расходимости практически не играет роли. В этом случае применяемый автором «простой способ», состоящий в том, что в статистическую сумму включаются все те и только те уровни, для которых имеются данные в базе NIST, также корректно работает, что и подтверждается хорошим согласием расчётов автора с результатами экспериментов, несмотря на то, что наличие или отсутствие уровня в базе данных во многом случайно.

8. Утверждение на стр. 160, что уравнение (4.25) «имеет куда большую область применимости, чем то же уравнение Больцмана, из которого оно получается», довольно спорно. Конечно, уравнение Больцмана можно переписать в виде (4.25), по определению задав время релаксации τ так, чтобы правая часть этого уравнения включала точный интеграл столкновений, но это переобозначение не меняет существа дела и не упрощает задачу: при этом τ не обязательно будет простой функцией энергии $\tau(\epsilon)$. Поэтому кинетическое уравнение Больцмана является более общим, чем приближение времени релаксации.

9. Работа написана хорошим, живым языком, но не свободна от опечаток и других мелких погрешностей, среди которых преобладают пунктуационные. Отмечу лишь опечатку в составной формуле (4.30), которая может повлиять на прочтение этой формулы: здесь перед T_F должна стоять запятая с пробелом, чтобы отделить последнее выражение от предпоследнего.

Указанные замечания являются незначительными. Они не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Е.М. Апфельбаума и не подвергают сомнению ни её основные выводы, ни новизну и достоверность полученных результатов. Автореферат диссертации достаточно полно и вполне точно описывает содержание работы. Материалы диссертации были представлены на многих научных конференциях и опубликованы в 39 статьях в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК при Минобрнауки РФ, в том числе большинство статей – в ведущих высокорейтинговых международных физических журналах. Несомненно определяющий вклад автора в постановку и решение задач,

описанных в диссертации, причём можно отметить, что в большинстве упомянутых публикаций Е.М. Апфельбаум является единственным автором.

Таким образом, можно с уверенностью заключить, что докторская диссертация Апфельбаума Е.М. вносит значительный вклад в развитие теории теплофизических свойств плазмы и представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая полностью соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения учёных степеней № 842 от 24.09.2013 г. в актуальной редакции, утверждённой постановлениями Правительства РФ, а автор данной диссертации Апфельбаум Евгений Михайлович заслуживает присуждения ему учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Отзыв составил:

Главный научный сотрудник
сектора теоретической астрофизики
ФТИ им. А.Ф. Иоффе
д.ф.-м.н.

 Потехин Александр Юрьевич

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26, тел.: +7 (812) 292-71-80,
сайт: <http://www.ioffe.ru/astro/DTA/palex/palex.html>, e-mail: palex@astro.ioffe.ru

Подпись Потехина Александра Юрьевича заверяю.

Заместитель директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе
по научной работе,
д.ф.-м.н.



П.Н. Брунков

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе),
адрес: 194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26,
тел.: +7 (812) 297-22-45, сайт: <https://ioffe.ru>, e-mail: post@mail.ioffe.ru.