

«Утверждаю»
Зам. директора
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Федеральный исследовательский центр
химической физики и медицинской химии
Российской академии наук
(ФИЦ ЦХФ и МХ РАН),
д-р хим. наук, Э.Р.Бадамшина



«10» февраля 2024 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации

на диссертационную работу Апфельбаума Евгения Михайловича
«Законы подобия на основе идеальных линий и теплофизические свойства
веществ на фазовой диаграмме жидкостей» на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 - теплофизика и
теоретическая теплотехника

Диссертация Апфельбаума Е. М. посвящена теоретическому исследованию идеальных линий и связанных с ними законов подобия. В диссертации, предложен общий метод построения кривых сосуществования жидкость-газ, имеющий широкое применение, в том числе для веществ, для которых эта линия не может быть получена экспериментально или надёжно рассчитана более точными методами. На примере низкотемпературной плазмы металлов рассмотрен вопрос о применимости рассматриваемых соотношений подобия для многокомпонентных систем. Для этого в работе разработана программа расчёта термодинамических и переносных свойств таких сред на

основе химического подхода и приближения времени релаксации. С её помощью было установлено, что для плазмы металлов существует более слабое подобие, чем для обычных однокомпонентных газов и жидкостей и были рассчитаны теплофизические свойства низкотемпературной плазмы ряда металлов, которые были получены впервые.

Актуальность работы обусловлена интересом к исследованию теплофизических свойств вещества в области малодоступной как для экспериментального, так и теоретического исследования современными методами, а также к созданию эффективных подходов для получения теплофизической информации о той части фазовой диаграммы, которая характерна для металлов в состоянии низкотемпературной плазмы, расширенных металлов и металлов в околоскритической и надкритической области параметров. Актуальными являются также разработка простых подходов, к каковым относятся методы, построенные на законах подобия, а также приближённые методы расчёта для плазмы металлов в рамках химического подхода, который может обеспечивать достаточно надежные результаты для области разреженных металлов.

Научная новизна диссертационной работы состоит в получении новых законов подобия на основе существующих и новых идеальных линий для различных физических величин, в определении области применимости установленных законов подобия, разработке методов построения бинодалей жидкость-газ и построении модели расчёта теплофизических свойств металлов и полупроводников. Выше перечисленное позволило исследовать фазовые диаграммы с новыми идеальными линиями, построить кривые сосуществования для металлов, для которых они недоступны из эксперимента, получить параметры их критических точек, рассчитать термодинамические и переносные свойства ряда веществ в важнейшей области фазовой диаграммы и рассмотреть вопрос о применимости изучаемых законов подобия для многокомпонентных систем на примере низкотемпературной плазмы металлов.

Теоретическая и практическая значимость полученных результатов состоит в следующем:

Внесен значительный вклад в развитие методов построения фазовых диаграмм и расчёта теплофизических свойств веществ. Предложенные в работе законы подобия на основе идеальных линий имеют фундаментальное значение, так как дополняют наши знания о структуре фазовой диаграммы вещества.

Построено общее уравнение для бинодали жидкость-газ и разработана методика определения параметров критических точек, что позволяет сравнительно просто применить это для тех веществ, где эксперимент, так сложные методы расчёта не позволяют этого сделать.

Разработан программный код для вычисления теплофизических свойств низкотемпературной плазмы металлов.

Получены данные о теплофизических свойствах низкотемпературной плазмы металлов, которые имеют широкую область применения в различных прикладных задачах, связанных с высокоэнергетическими процессами, включая задачи о взаимодействии мощных потоков частиц или излучения с веществом, построены соответствующие аналитические зависимости для применения полученных результатов в широкой области плотностей и температур.

Объём и структура диссертации. Диссертация содержит 296 страниц и состоит из введения, 4х глав, заключения, списка литературы из 372х наименований и 3х приложений.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель, указана степень разработанности темы и аргументирована научная новизна. Показаны теоретическая и практическая значимость полученных результатов, описана методология исследований, представлены научные положения, выносимые на защиту.

В 1й главе проведён общий обзор основных соотношений подобия, который показывает, что из них наиболее широкую область применимости на плоскости плотность-температура имеют так называемые геометрические соотношения подобия для идеальных линий различных величин, то есть линий, вдоль которых значение этой величины совпадает с идеально-газовым при тех же плотностях и температурах. Исследуемое же подобие заключается в том, что форма этой линии для целого ряда величин, таких как давление, энтальпия, и

т.д. остаётся одинаковой, независимо от рассматриваемого вещества. Для анализа формы и определения других свойств идеальных линий автором последовательно использованы уравнение Ван дер Ваальса, вириальные разложения и экспериментальные данные для реальных веществ из базы данных NIST, содержащей теплофизические информации для 150 веществ. В результате найдены новые соотношения подобия и установлено, что для большинства веществ выполняются как старые, так и новые соотношения подобия. Обсуждаются и причины отклонения, наблюдающиеся для некоторых веществ. Наряду с этим отдельно рассмотрен вопрос о форме идеальной линии давления в кристаллах.

Вторая глава посвящена исследованию модельных систем с известными потенциалами межчастичного взаимодействия как в трехмерном, так и двумерном случае, что позволило построить идеальные линии, проверить напрямую соотношения подобия путём численного моделирования, установить область применимости соотношений подобия через их связь с видом взаимодействия. Рассмотрены классы потенциалов с совпадающей функциональной формой и различными характеристическими параметрами, варьирование которых, меняло диапазон взаимодействия и позволило получить один из основных результатов диссертации об универсальности формы идеальных линий в определённом диапазоне значений характеристических параметров и отклонении всех линий от универсальной формы при повышении плотности и понижении температуры, что оказалось справедливым и для остальных соотношений подобия. С использованием этих соотношений и привлечением теории критических явлений, было получено интерполяционное уравнение для бинодали жидкость-газ, которое зависит от Бойлевских параметров, параметров критической точки и подгоночного параметра, соответствующего теплоте парообразования при нормальных условиях. Оказалось, что для модельных систем и реальных веществ, построенное уравнение описывает их с погрешностью не более 5 %. Разработанная дополнительно процедура для случая, когда известна лишь низкотемпературная часть бинодали и неизвестны критические параметры, что соответствует

большинству металлов, позволяет также оценить и параметры критической точки.

В 3й главе полученное в предыдущей главе уравнение применяется для целого ряда металлов. Показано, что для жидких металлов линия единичного фактора сжимаемости сохраняет свою прямолинейную форму, что позволяет определить Бойлевские параметры для металлов, построить бинадаль и определить параметры критической точки. Применение процедуры к целому ряду металлов показало, что полученные параметры критической точки находятся в хорошем согласии с результатами других авторов, включая результаты первопринципных расчётов в отличие от более разреженной области, возможно нарушение рассматриваемых законов подобия.

Четвертая глава посвящена решению двух задач. Одна заключается в поиске универсальной идеальной линии для давления плазменных сред. Сначала рассмотрена чисто кулоновская система без нейтральной компоненты, для которой с помощью групповых разложений было аналитически показано, что даже при низких плотностях для чисто кулоновской системы линейная форма для этой линии отсутствует, в то время как наблюдается более слабое подобие, заключающееся в степенной зависимости температуры от плотности (с нецелой степенью) вдоль исследуемой линии. Добавление нейтральной компоненты не позволяет получить аналитическую форму этой линии, оставляя возможность численного расчета. В результате применения химического подхода и его численной реализации найденное подобие было подтверждено и для плазмы с нейтральными частицами, но с другим показателем степени. Наличие разработанного автором программного кода позволило также решить задачу расчета теплофизических свойств низкотемпературной плазмы металлов, независимо от идеальных линий, а также с помощью приближения времени релаксации рассчитать электронные транспортные коэффициенты такой плазмы. Стоит отметить, что для ряда элементов термодинамические и транспортные данные в этой области до проведения настоящих расчётов отсутствовали.

В заключении подводятся общие итоги работы, формулируются выводы, обсуждаются дальнейшие направления и возможности исследований и приводятся **основные результаты** работы, состоящие в следующем.

1. На основе анализа большого количества экспериментальных данных были найдены новые законы подобия для существующих идеальных линий, а также найдены новые идеальные линии для различных физических величин. Впервые были построены фазовые диаграммы с этими линиями.

2. Методами численного моделирования идеальные линии были рассчитаны для модельных 2х и 3х мерных систем с известными потенциалами взаимодействия, были проверены найденные соотношения подобия и установлена область их применимости.

3. На основе известных и новых соотношений подобия предложен метод построения бинадали жидкость-газ и построен метод определения параметров критических точек металлов, для которых соответствующие данные пока ещё не могут быть измерены или рассчитаны более точными методами.

4. Построена модель расчёта теплофизических свойств низкотемпературной плазмы металлов (термодинамических свойств и электронных коэффициентов переноса) на основе химического подхода и приближения времени релаксации и впервые рассчитаны эти характеристики для ряда веществ.

5. Найдены законы подобия для многокомпонентных систем аналогичные тем, что установлены для однокомпонентных систем, и с помощью построенной модели расчёта теплофизических свойств рассмотрен вопрос об их применимости на примере низкотемпературной плазмы металлов. С помощью указанной модели построена линия единичного фактора сжимаемости для целого ряда металлов.

В приложении А представлена таблица для 70 веществ (для которых доступны данные измерений) с параметрами их характеристических точек, определяющие их фазовую диаграмму, исследуемые идеальные линии и связанные с ними законы подобия

В приложении Б представлены аппроксимационные формулы для теплофизических свойств низкотемпературной плазмы висмута, рассчитанных в

четвертой главе. Формулы для каждой величины представлены в виде полиномиальных зависимостей как функций от температуры и плотности, что позволяет использовать их в практических приложениях.

В приложении В представлены аналогичные аппроксимационные формулы для низкотемпературной плазмы индия.

Рекомендации по использованию результатов и выводов работы

Полученные в диссертационной работе новые результаты, касающиеся законов подобия, исследования свойств низкотемпературной плазмы и вещества с высокой плотностью энергии представляют несомненный интерес для специалистов в данных областях. С полученными результатами целесообразно ознакомить для применения в следующих организациях: Объединенный институт высоких температур РАН, Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, НИЦ Курчатовский Институт, Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и др.

Апробация работы. Материалы диссертации опубликованы в 39 статьях в рецензируемых научных журналах, которые входят в перечень ВАК и индексируются системами Web of Science и Scopus. Результаты, представленные в диссертации, доложены автором лично на пятидесяти трех всероссийских и международных конференциях.

Личный вклад автора. Личный вклад автора заключается в получении новых теоретических результатов, посвященных законам подобия, разработке моделей и соответствующих программных кодов для расчета параметров исследуемых веществ и отражен в публикациях, на основе которых написана диссертация. Все представленные в диссертации результаты получены автором лично и были доложены им на различных конференциях и семинарах. В совместных работах вклад диссертанта был определяющим.

13. По диссертационной работе можно сделать следующие замечания.

1. Текст диссертации сопровождается значительным количеством орфографических ошибок и досадных опечаток.
2. К сожалению, часть формул содержат досадные неточности, из-за которых ускользает их смысл. Так на стр.93 приведены формулы для двух вариантов верхней границы рассматриваемого температурного диапазона, но, судя по приведенным выражениям, каждый раз верхняя граница всегда совпадает с нижней.
2. В четвертой главе автором представлен разработанный им вариант термодинамической модели на основе квазихимического подхода. Далее на основе этой модели строится расчет переносных свойств низкотемпературной плазмы. Но основным критерием применимости модели является сравнение с экспериментом и, если для коэффициентов переноса, такое сравнение представлено достаточно широко, то для термодинамических свойств, приведенных данных на наш взгляд явно недостаточно. Так, нет сравнения полученных в диссертации термодинамических результатов с обширными данными, полученными в ударно-волновых экспериментах, что на наш взгляд было бы весьма информативно

Перечисленные выше замечания не носят принципиальный характер и не затрагивают основных результатов диссертационной работы. Изложенные в диссертации результаты достаточно хорошо обоснованы и прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях. На основе проведенных исследований опубликовано 39 статей в рецензируемых научных журналах, которые входят в перечень ВАК и индексируются системами Web of Science и Scopus.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Заключение по диссертационной работе

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по актуальности поставленных задач, научной новизне,

теоретической и практической значимости, достоверности полученных результатов, степени обоснованности выводов, объему выполненных исследований и уровню публикаций в открытой печати полностью соответствует квалификационным требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор Е.М.Апфельбаум заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника.

Диссертация была заслушана и обсуждена на заседании семинара Отдела экстремальных состояний вещества ФГБУН ФИЦ ПХФ и МХ РАН 16 февраля 2024 года (протокол № 2).

Отзыв составил:

Главный научный сотрудник,
Член-корреспондент РАН



В.Б. Минцев

Подпись В.Б Минцева удостоверяю
Ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ РАН

д.х.н.

+7(496) 522 19 32, psi@icp.ac.ru



Б.Л. Психа

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук 142432, Московская область, г. Черноголовка, проспект академика Семенова, 1, тел. +7(495) 993-57-07, +7 (496) 522-44-74, e-mail: director@icp.ac.ru, office@icp.ac.ru.