

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 01.03.15  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК**

от «04» июня 2021 г. № 14

о присуждении Коваленко Максиму Алексеевичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Высокотемпературная гелиевая дефектоскопия и молекулярно-динамическое моделирование анионодефектных кристаллов диоксида церия» по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника принята к защите диссертационным советом УрФУ 01.03.15 «26» апреля 2021 г. протокол № 12.

Соискатель, Коваленко Максим Алексеевич, 1980 года рождения.

В 2003 г. окончил ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ» по специальности «Физика кинетических явлений»;

обучался в очной аспирантуре ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ» по специальности 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника с 01.11.2003 г. по 01.09.2006 г., с 01.04.2020 г. был прикреплен для подготовки диссертации на соискание ученой степени кандидата наук по направлению 03.06.01 Физика и астрономия (Теплофизика и теоретическая теплотехника), предполагаемый срок окончания прикрепления 31.03.2023 г.;

работает на кафедре технической физики Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» в должностях: электроника, старшего преподавателя (по совместительству).

Диссертация выполнена на кафедре технической физики Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, Купряжкин Анатолий Яковлевич, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Физико-технологический институт, кафедра технической физики, профессор.

Официальные оппоненты:

**Галашев Александр Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория электродных процессов, главный научный сотрудник;

**Козлов Александр Владимирович** – доктор технических наук, АО «Институт реакторных материалов», г. Заречный Свердловской области, отдел научно-инновационного развития, эксперт;

**Выходец Владимир Борисович** – кандидат физико-математических наук, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория нанокompозитных мультиферроиков, ведущий научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 23 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации 19 работ, из них 10 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ и входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации – 15,9 п.л., авторский вклад – 9,0 п.л.

Основные публикации по теме диссертации:

*статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:*

1. Коваленко, М.А. Масс-спектрометрическое исследование диффузии и растворимости гелия в цериево-гадолиниевой керамике с субмикроструктурной структурой / **М.А. Коваленко**, А.Я. Купряжкин, В.В. Иванов // **Журнал технической физики**. – 2010. – том 80, вып. 1. – С. 138–141. 0,66 п.л. / 0,25 п.л.

Kovalenko M.A. Mass-spectrometric analysis of diffusion and solubility of helium in cerium–gadolinium ceramics with a submicrocrystalline structure / **М.А. Kovalenko**, А.Ya. Kupryazhkin, V.V. Ivanov // **Technical physics**. – 2010. –Vol. 55, No. 1. – P. 137–140. 0,66 п.л. / 0,25 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

2. Купряжкин, А.Я. Низкотемпературная гелиевая дефектоскопия и взаимодействие гелия с ионами цериево-гадолиниевой керамики  $\text{Ce}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{O}_{1.9}$  с субмикроструктурной структурой / А.Я. Купряжкин, **М.А. Коваленко**, А.В. Коромыслов, А.Н. Жиганов // **Физика твердого тела**. – 2011. – том 53, вып. 6. – С. 1133–1135. 0,56 п.л. / 0,17 п.л.

Kupryazhkin A.Ya. Low-temperature helium defectoscopy and interaction of helium with ions of cerium gadolinium ceramics  $\text{Ce}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{O}_{1.9}$  with a submicrocrystalline structure / А.Ya. Kupryazhkin, М.А. Kovalenko, А.V. Koromyslov, А.N. Zhiganov // **Physics of the solid state**. – 2011. –Vol. 53, No. 6. – P. 1198–1201. 0,56 п.л. / 0,17 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

3. Kovalenko, M.A. Melting and superionic transition of Gd-doped ceria nanocrystals: Molecular dynamics study / **М.А. Kovalenko**, А.Ya. Kupryazhkin // **Journal of Nuclear Materials**. – 2012. – Vol. 430. – P. 12–19. 1,73 п.л. / 0,9 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

4. Коромыслов, А.В. Гелиевая дефектоскопия цериево-гадолиниевой керамики  $\text{Ce}_{0.8}\text{Gd}_{0.2}\text{O}_{1.9}$  с субмикроструктурной структурой в области примесного разупорядочения / А.В. Коромыслов, А.Н. Жиганов, **М.А.**

**Коваленко, А.Я. Купряжкин // Физика твердого тела.** – 2013. – том 55, вып. 12. – С. 2412–2416. 0,91 п.л. / 0,24 п.л.

Koromyslov A.V. Helium defectoscopy of cerium gadolinium ceramics  $Ce_{0,8}Gd_{0,2}O_{1,9}$  with a submicrocrystalline structure in the impurity disorder region / A.V. Koromyslov, A.N. Zhiganov, **M.A. Kovalenko**, A.Ya. Kupryazhkin // **Physics of the solid state.** – 2013. – Vol. 55, No. 12. – P. 2537–2542. 0,91 п.л. / 0,24 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

5. Kovalenko, M.A. Influence of impurity-vacancy disorder on characteristics of gadolinium-doped ceria oxide: Molecular dynamics study / **M.A. Kovalenko**, A.Ya. Kupryazhkin // **Journal of Nuclear Materials.** – 2013. – Vol. 440. – P. 158–168. 2,68 п.л. / 1,77 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

6. Kovalenko, M.A. Structure and mass transport characteristics of the surface of gadolinium-doped ceria nanocrystals: Molecular dynamics study / **M.A. Kovalenko**, A.Ya. Kupryazhkin // **Surface Science.** – 2013. – Vol. 618. – P. 120–131. 2,5 п.л. / 1,65 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

7. Коваленко, М.А. Изотопический эффект при диффузии кислорода в несовершенных кристаллах оксида церия / **М.А. Коваленко**, А.Я. Купряжкин // **Журнал технической физики.** – 2015. – том 85, вып. 2. – С. 1–7. 1,24 п.л. / 0,62 п.л.

Kovalenko M.A. Isotopic effect at oxygen diffusion in imperfect crystals of cerium oxide / **M.A. Kovalenko**, A.Ya. Kupryazhkin // **Technical physics.** – 2015. – Vol. 60, No. 2. – P. 155–161. 1,24 п.л. / 0,62 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

8. Kovalenko, M.A. Mechanisms of the defect formation and diffusion of cations on the surface of uranium dioxide nanocrystals: Molecular dynamics study / **M.A. Kovalenko**, A.Ya. Kupryazhkin // **Journal of Nuclear Materials.** – 2015. – Vol. 459. – P. 20–29. 2,08 п.л. / 1,37 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

9. Kovalenko, M.A. Influence of defects on the diffusion of helium in uranium dioxide: Molecular dynamics study / **M.A. Kovalenko**, A.Ya.

Kupryazhkin, S. K. Gupta // **AIP Conference Proceedings**. – 2019. – Vol. 2142. – P. 020002-1– 020002-7. 1,21 п.л. / 0,72 п.л. (*Scopus*)

10. Ryzhkov, M.V. Transformation of electron density distribution induced by the cation point defects in uranium dioxide / M.V. Ryzhkov, **M.A. Kovalenko**, A.Ya. Kupryazhkin, S.K.Gupta // **Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry**. – 2020. – Vol. 325. – P. 253–262. 1,96 п.л. / 0,65 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

На автореферат поступили отзывы от:

1. **Рисованого Владимира Дмитриевича**, доктора технических наук, профессора, научного руководителя научного дивизиона Государственной корпорации Росатом АО «Наука и инновации», г. Москва. Содержит замечания, касающиеся модернизации метода гелиевой дефектоскопии; погрешности при измерении концентрации гелия; наличия различных механизмов диффузии при дегазации гелия.

2. **Габиса Игоря Евгеньевича**, доктора физико-математических наук, профессора, профессора кафедры электроники твердого тела ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», г. Санкт-Петербург. Содержит вопрос о миграционных путях гелия в стехиометрических образцах.

3. **Байдакова Владимира Георгиевича**, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего лабораторией криогеники и энергетики, научного руководителя института, и **Проценко Сергея Павловича**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника, старшего научного сотрудника лаборатории криогеники и энергетики ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов обосновывается известностью их научных достижений, большим научным вкладом и авторитетом в области

теплофизики и физики конденсированного состояния, и, в частности, исследования свойств оксидных систем.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение научной задачи изучения процессов растворимости и диффузии гелия в оксидной цериево-гадолиниевой керамике, исследования теплофизических, структурных свойств и процессов массопереноса в нанокристаллах диоксида церия с примесью гадолиния в широком диапазоне температур, в том числе, при фазовых переходах, что имеет существенное значение для развития атомно-водородной энергетики.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Обнаружено чрезвычайно сильное влияние стехиометрии по кислороду на растворимость и коэффициенты диффузии гелия в оксидной цериевой керамике. Контроль стехиометрии позволил измерить растворимость гелия в широком диапазоне температур и давлений, определить энергию связи гелия с кристаллом.

2. Анализ результатов, полученных методом гелиевой дефектоскопии, позволил сделать вывод о том, что гелий растворяется в примесных анионных вакансиях, в первом окружении которых отсутствуют примесные катионы гадолиния.

3. Методом молекулярной динамики рассчитаны температурные зависимости концентраций примесных анионных вакансий в зависимости от

ближайшего катионного окружения, и их энергии образования. Результаты расчетов подтверждают вывод, сделанный в предыдущем пункте.

4. Оригинальные алгоритмы для обнаружения вакансий и аппроксимации поверхности нанокристаллов позволили методом молекулярной динамики рассчитать ряд теплофизических, структурных и масс-транспортных свойств нанокристаллов диоксида церия, в том числе, в зависимости от концентрации примеси гадолиния.

Результаты диссертации расширяют представление о механизмах растворимости гелия в оксидной керамике, свидетельствуют о различном характере взаимодействия катионов с атомами гелия.

Обнаружены условия, при которых резко увеличивается скорость диффузии гелия и уменьшается его растворимость. Это может быть использовано, например, для удаления продуктов альфа-распада из оксидного ядерного топлива с гадолинием в качестве выгорающего элемента.

Разработан высокоскоростной пакет программ, который позволяет методом молекулярной динамики моделировать многокомпонентные ионные нанокристаллы. Реализованные алгоритмы динамического определения вакансий и аппроксимации поверхности нанокристалла октаэдром с усеченными вершинами могут быть использованы для изучения процессов, происходящих на поверхностях пленок или в границах зерен, непосредственное экспериментальное исследование которых зачастую невозможно.

На поверхности примесных нанокристаллов диоксида церия обнаружена линейная зависимость изотопического эффекта при диффузии кислорода от температуры, что в перспективе может быть использовано для разделения изотопов кислорода с помощью поликристаллической оксидной керамики с развитыми границами зерен.

Методика и результаты расчетов площадей поверхности нанокристаллов различного типа могут быть использованы для создания и совершенствования современных катализаторов.

На заседании 04 июня 2021 г. диссертационный совет УрФУ 01.03.15 принял решение присудить Коваленко М.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении открытого голосования диссертационный совет УрФУ 01.03.15 в количестве 17 человек, из них в удаленном интерактивном режиме – 7, в том числе 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 17, против – нет, воздержались – нет.

Председатель  
диссертационного совета  
УрФУ 01.03.15



Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
УрФУ 01.03.15



Ищенко Алексей Владимирович

04 июня 2021 г.