

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 1.3.02.06
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК**

от 02 июня 2023 г. № 14

о присуждении Сеитову Дастану, гражданство Республики Казахстан, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива» по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите диссертационным советом УрФУ 1.3.02.06 «28» сентября 2022 г., протокол № 15.

Соискатель, Сеитов Дастан, 1992 года рождения,

в 2017 г. окончил ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 14.04.02 Ядерная физика и технологии;

в 2021 г. окончил очную аспирантуру ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 14.06.01 Ядерная, тепловая и возобновляемая энергетика и сопутствующие технологии (Атомное реакторостроение, машины, агрегаты и технология материалов атомной промышленности);

с 12.09.2022 г. по 11.02.2023 г. был прикреплен к ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» в качестве экстерна для сдачи кандидатских экзаменов по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния;

работает в должности инженера-исследователя кафедры технической физики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

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:

Байдаков Владимир Георгиевич – доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН Институт теплофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, научный руководитель института;

Козлов Александр Владимирович – доктор технических наук, АО «Институт реакторных материалов», г. Заречный (Свердловская обл.), главный научный сотрудник;

Стегайлов Владимир Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент, ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, г. Москва, отдел 14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования, заведующий отделом

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 11 работ, из них 10 статей в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ и входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации – 5,89 п.л., авторский вклад – 1,59 п.л.

Основные публикации по теме диссертации

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

1. **Seitov, D.D.** A mechanism of cation diffusion in ThO₂ nanocrystal bulk. A molecular dynamic simulation / **D.D. Seitov**, S.S. Pitskhelaury, K.A. Nekrasov,

A.S. Boyarchenkov, A. Ya. Kupryazhkin // AIP Conference Proceedings. – 2022. – Vol. 2466. – P. 030040. 0,38 п.л. / 0,1 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

2. Nekrasov, K.A. Diffusion of oxygen in hypostoichiometric uranium dioxide nanocrystals. A molecular dynamics simulation / K.A. Nekrasov, A.E. Galashev, **D.D. Seitov**, S.K. Gupta // *Chimica Techno Acta*. – 2021. – Vol. 8, No 1. – P. 20218107. 0,75 п.л. / 0,19 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

3. Nekrasov, K.A. Sputtering of material from the surface of PuO₂ crystals by collision cascades impact. A molecular dynamics study / K.A. Nekrasov, **D.D. Seitov**, A.A. Pomosova, A.Ya. Kupryazhkin, S.K. Gupta, A.B. Usseinov // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2020. – Vol. 475. – P. 39–43. 1,25 п.л. / 0,31 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

4. **Seitov, D.D.** The impact of the collision cascades on the xenon and helium clusters in PuO₂ crystals. A molecular dynamics simulation / **D.D. Seitov**, K.A. Nekrasov, A.Ya. Kupryazhkin, S.K. Gupta, A.B. Usseinov // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2020. – Vol. 476. – P. 26–31. 1,37 п.л. / 0,34 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

5. **Seitov, D.D.** A simulation of the helium diffusion in uranium dioxide crystals: a comparison of the interaction potentials / **D.D. Seitov**, K.A. Nekrasov, A.Ya. Kupryazhkin, S.K. Gupta, A.T. Akilbekov // *Bulletin of the Karaganda University. «Physics» series*. – 2017. – Vol. 87, No 3. – P. 26–30. 0,38 п.л. / 0,19 п.л. (*Web of Science*)

6. **Seitov, D.D.** A comparison of inter-particle potentials for molecular dynamic simulation of the impact of collision cascades on xenon bubbles in plutonium dioxide / **D.D. Seitov**, S.S. Pitskhelaury, K.A. Nekrasov, A. Ya. Kupryazhkin // *AIP Conference Proceedings*. – 2020. – Vol. 2313. – P. 070003. 0,31 п.л. / 0,08 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

7. **Seitov, D.D.** Sintering of uranium dioxide nanoparticles. A molecular dynamics simulation / **D.D. Seitov**, Y.Y. Gracheva, K.A. Nekrasov, A. Ya.

Kupryazhkin, S.K. Gupta, A.T. Akilbekov // AIP Conference Proceedings. – 2019. – Vol. 2174(1). – P. 020058. 0,31 п.л. / 0,08 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

8. Nekrasov, K.A. The equilibrium shapes of plutonium dioxide nanocrystals: A molecular dynamics simulation / K.A. Nekrasov, A.S. Boyarchenkov, **D.D. Seitov**, S.K. Gupta, A. Ya. Kupryazhkin // AIP Conference Proceedings. – 2020. – Vol. 2220(1). – P. 130002. 0,38 п.л. / 0,1 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

9. Popov, I.A. The temperature dependence of the vacancy concentration in (U, Pu)O₂ crystals. A molecular dynamics simulation / I.A. Popov, K.A. Nekrasov, **D.D. Seitov**, S.K. Gupta // AIP Conference Proceedings. – 2018. – Vol. 2015. – P. 020076. 0,38 п.л. / 0,1 п.л. (*Web of Science, Scopus*)

10. **Seitov, D.D.** Re-resolution of Xenon Clusters in Plutonium Dioxide under the Collision Cascade Impact: A Molecular Dynamics Simulation / **D.D. Seitov**, K.A. Nekrasov, A. Ya. Kupryazhkin, S.K. Gupta, A.T. Akilbekov // AIP Conference Proceedings. – 2017. – Vol. 1886. – P. 020018. 0,38 п.л. / 0,1 п.л. (*Web of Science, Scopus*).

На автореферат поступили отзывы от:

1. **Рисованого Владимира Дмитриевича**, доктора технических наук, профессора, научного руководителя АО «Наука и инновации», г. Москва. Содержит замечание: при рассмотрении баллистических каскадов, в автореферате не обсуждается торможение быстрых частиц электронной подсистемой кристалла. Учитывалось ли такое торможение при моделировании, а если нет, то можно ли оценить ошибку, обусловленную этим упрощением?

2. **Рыжкова Михаила Владимировича**, доктора химических наук, старшего научного сотрудника, ведущего научного сотрудника лаборатории квантовой химии и спектроскопии ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Содержит замечания: 1) На стр. 9 говорится об использовании «эффективных» зарядов ионов актинидов и кислорода при построении парных потенциалов взаимодействия. Отличаются ли они от формальных зарядов +4 и –2, и если

отличаются, то из каких соображений получены. 2) Начиная со стр. 16 и далее отмечается, что в пузырях радиогенных инертных газов внутри нанокристаллов актинидов газовые атомы формируют нечто близкое к решетке кристаллов этих газов. Не существует ли здесь противоречия с тем, что в силу слабого взаимодействия атомов инертные газы кристаллизуются лишь при очень низких температурах?

3. **Кондратюка Николая Дмитриевича**, кандидата физико-математических наук, заведующего лабораторией многомасштабного моделирования в физике мягкой материи ФГАОУ ВО «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», г. Долгопрудный, Московская обл. Без замечаний.

4. **Рахмановой Оксаны Рашитовны**, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника лаборатории высокотемпературной электрохимии актинидов и редкоземельных металлов ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Без замечаний.

5. **Галиахметовой Лейсан Халиловны**, кандидата физико-математических наук, научного сотрудника ФГБУН Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, г. Уфа. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов обосновывается их широкой известностью своими достижениями и высокой научной компетентностью в области физики конденсированного состояния, близостью тематики проводимых ими исследований и темы диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, связанной с описанием механизмов и получением количественных характеристик радиационного разупорядочения, изучением

явлений переноса в облученных кристаллах оксидного ядерного топлива $(U,Pu)O_2$ и ThO_2 методом классического молекулярно-динамического моделирования нанокристаллов со свободной поверхностью, изолированных в вакууме, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

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

– Установлено, что коэффициенты диффузии урана и плутония в объёме смешанных оксидов $(U,Pu)O_2$ при температурах от 2650 К до 3100 К и вакансионном механизме перемещения имеют значения от $2 \cdot 10^{-12}$ до $3 \cdot 10^{-9}$ $см^2/с$. Вакансионный механизм реализуется движением катионной вакансии с поверхности через объём. Коэффициенты диффузии тория в объёме кристалла ThO_2 при температурах от 3100 К до 3600 К и вакансионном механизме диффузии находятся в пределах от $5 \cdot 10^{-12}$ до $3 \cdot 10^{-10}$ $см^2/с$. При этом, катионы навстречу вакансии перемещаются коллективно: смещение одного из катионов в междоузельную позицию приводит к диффузионным прыжкам соседних катионов.

– Предложены новые потенциалы взаимодействия гелия и криптона с окружением в кристаллах UO_2 и PuO_2 , учитывающие экспериментальные и расчетные данные о сильном связывании гелия с многозарядными катионами и криптона с кислородом. Значения коэффициента междоузельной диффузии гелия, рассчитанные с использованием предложенных потенциалов, при температурах от 1600 К до 3025 К находятся в диапазоне от $1,3 \cdot 10^{-7}$ до $4 \cdot 10^{-4}$ $см^2/с$, с энергиями активации от 2,2 до 2,7 эВ. Междоузельная диффузия криптона характеризовалась энергией активации, равной 4,8 эВ, атом перемещался через анионную вакансию.

– Установлено, что воздействие баллистических каскадов столкновений на ксеноновые, гелиевые и смешанные ксенон-гелиевые

пузырьки приводит к отрыву отдельных атомов, получающих существенную часть энергии первичной частицы. В отличие от ксенона, гелий диффундирует из пузырька в область, разупорядоченную баллистическим каскадом.

– Установлено, что приповерхностные баллистические каскады вызывают распыление вещества с поверхности нанокристаллов PuO_2 , с отрывом как одиночных молекул, так и кластеров. При энергии первичного ядра отдачи, равной 87,7 кэВ, максимальный размер кластера составил 949 частиц. Картины разрушения поверхностей, образованных плоскостями типа (100) и (111), оказываются схожими. Полученные данные указывают на большую устойчивость поверхностей (111) к воздействию баллистических каскадов.

Рассчитанные значения коэффициентов диффузии урана, плутония, тория и кислорода могут быть использованы для описания явлений переноса в кристаллах оксидного ядерного топлива в суперионном состоянии, совершенствования методик электрохимического восстановления урана из облученного ядерного топлива.

Предложенные потенциалы взаимодействия радиогенных газов в кристаллах $(\text{U,Pu,Th})\text{O}_2$ представляют интерес для дальнейшего моделирования переноса и перерастворения этих газов в оксидном ядерном топливе.

Полученные данные о взаимодействии баллистических каскадов столкновений с поверхностью кристалла PuO_2 могут быть использованы при построении моделей рекристаллизации и преобразования границ зерна в ядерном топливе.

На заседании 02 июня 2023 г. диссертационный совет УрФУ 1.3.02.06 принял решение присудить Сеитову Дастану ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет УрФУ 1.3.02.06 в количестве 19 человек, из них 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек,

входящих в состав совета, проголосовали за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель
диссертационного совета
УрФУ 1.3.02.06

Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь
диссертационного совета
УрФУ 1.3.02.06

Ищенко Алексей Владимирович

02 июня 2023 г.