

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу СЕИТОВА Дастана «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Разработка новых циклов для реакторов-размножителей на базе оксидного ядерного топлива, как альтернативы «сжигаемому» сегодня U-235, открывает новые, долгосрочные перспективы в развитии ядерной энергетики. Оксиды планируется использовать в высокотемпературных реакторах с газовым охлаждением, в реакторах со свинцовым, натриевым и гелиевым теплоносителями, а также в энергетических реакторах космических систем.

Одна из проблем реализации данной программы связана с деградацией физических характеристик ядерного топлива под действием нейтронного облучения. Экспериментальные исследования радиационно-стимулированных процессов охрупчивания и разбухания топлива, накопления радиогенных газов, образования вакансионных полостей и газовых пузырьков затрудняют высокие температуры, радиационный фон. Новые возможности здесь открывают методы компьютерного моделирования, позволяющие получить информацию не только о макроскопических характеристиках ядерного топлива (теплопроводность, коэффициент диффузии), но и детально изучить протекание радиационно-стимулируемых процессов на атомарном уровне. В этой связи диссертационная работа Сеитова Д., направленная на молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и переноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива, безусловно **актуальна**, а поставленные в ней задачи отличаются научной **новизной** и **практической значимостью**.

Диссертация включает введение, пять глав и заключение. В первой главе формулируется задача молекулярно-динамического моделирования. Обоснуется выбор моделей, граничных условий, метода интегрирования классических уравнений движения частиц. Моделирование радиационно-стимулируемых процессов в кристаллах оксидов предъявляет жесткие требования к производительности вычислений. Последнее достигается использованием оригинального программного обеспечения, созданного в научной группе, где работал диссертант, путем распараллеливания вычислений на графических процессорах.

Взаимодействия ионов в кристаллах оксидов урана, плутония и тория описывались эмпирическими парными потенциалами, параметры которых определены внутри исследовательской группы диссертанта. При моделировании баллистических каскадов столкновений эти потенциалы модифицировались. Для описания взаимодействия атомов инертных газов с ионами оксидов урана и плутония предложены новые парные потенциалы.

Изучению миграции ионов урана, плутония и тория посвящена вторая глава. Кристаллы имели свободную поверхность, обеспечивающую естественное образование дефектов Шоттки. Показано, что основным механизмом диффузии катионов в нанокристаллах урана и плутония является вакансионный механизм, причем одиночные вакансии могли стимулировать каскады перемещений катионов. Выявлены особенности миграции катионов тория. Для трех опробованных модельных потенциалов взаимодействия не обнаружено зависимости коэффициентов диффузии кислорода от стехиометрии нанокристаллов оксида урана.

Диффузия одиночных атомов гелия и криптона исследуется в третьей главе. Построены «высокоэнергетические» потенциалы, с использованием которых рассчитаны коэффициенты междоузельной диффузии гелия и криптона. Показано, что в отличие от гелия, для которого наблюдается прямая междоузельная диффузия, миграция атомов криптона в диоксидах урана и плутония происходит через промежуточные позиции – анионные вакансии.

Одним из продуктов деления в ядерном реакторе являются инертные газы (гелий, криптон, ксенон). Данные вещества образуют в матрице оксидного топлива скопления размером 1-10 нм с плотностью близкой к кристаллической. Скопления выполняют роль «ловушек», препятствующих выходу атомов инертных газов на границы зерен ядерного топлива. Изучению механизмов образования и распада таких скоплений на атомарном уровне посвящена четвертая глава. Исследовано поведение ксеноновых, гелиевых и смешанных гелий-ксеноновых кластеров в матрице оксида плутония находящейся под воздействием каскадов столкновений, создаваемых ядрами отдачи. Установлено, что баллистические каскады столкновений могут инициировать разрушение таких образований и приводить как к выводу радиогенных газов из объема нанокристалла на его границу, так и способствовать переносу атомов инертных газов в радиационно-поврежденные области кристалла.

В пятой главе проведено молекулярно-динамическое моделирование распыления диоксида плутония с поверхности нанокристаллов, изолированных в вакууме. Такой распыл мог инициировать каскад столкновений, связанный с альфа-

распадом плутония. Установлено, что рассеивание происходит в форме одиночных ионов, молекул и кластеров, содержащих до сотен частиц. Отмечена высокая вероятность образования в процессе распыла кластеров больших размеров. Оценены энергии высвобождаемых при распыле частиц, их заряд.

Диссертационное исследование СЕИТОВА Дастана прошло апробацию на 7 международных и российских конференциях, результаты опубликованы в 11 научных работах, в том числе 10 статьях в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и индексируемых в международных базах.

Диссертация написана ясным, литературным языком, хорошо оформлена. Автореферат правильно передает содержание диссертации.

По диссертации имеются следующие вопросы и замечания:

1. В параграфе 2.2.3 (стр. 52-53) установленная для нанокристаллов оксида тория размерная (от числа частиц) зависимость энергии активации диффузии, которая не была выявлена в нанокристаллах оксидов урана и плутония, относится к суперионному переходу. Единственный аргумент в пользу этого – излом (перегиб) на температурной зависимости коэффициента самодиффузии. Хотелось бы услышать и другие аргументы в пользу этого. Термин суперионный переход подразумевает фазовое превращение в бинарной упорядоченной системе, когда при изменении термодинамического состояния одна из подрешеток теряет устойчивость, а другая её сохраняет. Вопрос связан с тем, что имеется работа (М.А. Кортнева, С.В. Стариков. ФТТ, 2016. 58 №1. 170-175), в которой при молекулярно-динамическом моделировании диоксида урана с использованием парного потенциала MOX-07 в том же диапазоне температур, что и у диссертанта, но по другому параметру, был зарегистрирован суперионный переход.

2. Чисто стилистическое замечание, касающееся терминологии (гл. 4). Связанное состояние радиогенных газов в матрице оксидного топлива, имеющее плотность упаковки кристалла, именуется как пузырек. Не совсем удачное название. Это скорее капелька или кластер.

3. Формируемые в матрице оксидного топлива кластеры из атомов инертных газов не могут быть термодинамически устойчивыми образованиями. Каковы времена их жизни в отсутствии баллистических столкновений с быстрыми частицами? Чем обусловлена их относительная устойчивость? Анализировалась ли в работе модель гетерогенного перераспределения для процесса разрушения скоплений радиогенных газов? На стр. 78 (конец второго абзаца), после описания этой модели, даётся ссылка на работу диссертанта.

Высказанные замечания не снижают общей ценности работы. Полученные в ней результаты обладают теоретической и практической значимостью. Они

позволяют глубже, на атомарном уровне, понять характер и механизмы протекающих в оксидном ядерном топливе процессов и могут быть использованы при разработке и построении теоретических моделей таких процессов.

Диссертационная работа СЕИТОВА Дастана «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива» по степени разработанности и актуальности темы, достоверности и обоснованности полученных результатов соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а её автор СЕИТОВ Дастан заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,

БАЙДАКОВ Владимир Георгиевич

доктор физико-математических наук по специальности 1.3.10. Физика низких температур, профессор,

Научный руководитель Института теплофизики Уральского отделения Российской академии наук,

620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106

тел: 8(343)267-88-06

E-mail: baidakov@itp.uran.ru


Байдаков В.Г.

22 мая 2023 г

Подпись Байдакова В. Г.

