

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сеитова Дастана «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Дастана Сеитова посвящена изучению методом классической молекулярной динамики механизмов и количественных характеристик радиационного дефектообразования и переноса в облученных кристаллах диоксидов тория, урана и плутония. Рассчитаны коэффициенты диффузии ионов актинидов при высоких температурах и в суперионном состоянии. Вычислены коэффициенты диффузии кислорода в гипостехиометрическом UO_{2-x} . Предложены потенциалы взаимодействия радиогенных газов гелия, криптона и ксенона в кристаллах ThO_2 , UO_2 и PuO_2 . Особенностью данной работы является рассмотрение модельных нанокристаллов со свободной поверхностью, достаточно больших, чтобы моделировать реальное зерно ядерного топлива. Постановка и решение этих задач, несомненно, являются актуальными, поскольку позволяют дать ответы на ряд вопросов, связанных с разработкой топлива для высокотемпературных реакторов с газовым охлаждением, а также быстрых реакторов со свинцовым, натриевым и гелиевым теплоносителями.

Следует отметить удачный выбор методики расчетов, позволяющей существенно увеличить времена эволюции модельных систем и тем самым расширить температурные диапазоны исследования нанокристаллов. Впервые нижняя граница температурного диапазона при расчете коэффициентов диффузии катионов тория находилась за пределами суперионного состояния. В работе предложен новый механизм диффузии ионов тория, заключающийся в сложном коллективном перемещении через междоузельные позиции, а также новые потенциалы взаимодействия для моделирования поведения радиогенных газов – гелия, криптона и ксенона с актинидами и кислородом. Проведенное системное моделирование воздействия баллистических каскадов столкновений, вызываемых α -распадом плутония на смешанные ксенон-гелиевые

пузырьки в диоксиде плутония и взаимодействия приповерхностных баллистических каскадов с поверхностью нанокристаллов PuO_2 не имеет аналогов в литературе, и поэтому научная новизна работы не вызывает сомнения.

Достоверность сделанных в работе выводов подтверждена использованием хорошо зарекомендовавшего себя эмпирических потенциалов взаимодействия, воспроизводящих широкий набор свойств реальных кристаллов, согласием поведения модельных систем с существующими физическими представлениями, а также количественным совпадением полученных результатов с известными экспериментальными данными и расчетами других авторов. Значимость результатов проведенных исследований для науки и практики определяется тем, что они могут быть использованы для дальнейшего моделирования переноса и перерастворения радиогенных газов в ядерном топливе, для построения моделей рекристаллизации и преобразования границ зерна в ядерном топливе под воздействием нейтронного облучения.

При чтении автореферата у меня возникли два вопроса.

На стр. 9 говорится об использовании “эффективных” зарядов ионов актинидов и кислорода при построении парных потенциалов взаимодействия, однако, в тексте автореферата я не нашел информации о каких величинах идет речь, отличаются ли они от формальных зарядов +4 и -2, и если отличаются, то из каких соображений получены.

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. Возникает вопрос: поскольку взаимодействие атомов инертных газов очень слабое, то формирование их кристаллических решеток должно происходить при очень низких температурах, которые, вряд ли возможны в ядерном топливе в процессе работы реактора. Было бы интересно услышать объяснение диссертантом этого противоречия.

Указанные вопросы не снижают хорошего впечатления, которое оставляет диссертация. Работа в целом представляет собой серьезное научное исследование, выполненное на высоком научно-методическом уровне, направленное на решение важных и практически значимых задач. Полученные результаты обобщают и

значительно расширяют существующие представления о разупорядочении и массопереносе в кристаллах диоксидов тория, урана и плутония. Используемая терминология, язык и стиль автореферата соответствуют стандартам, принятым в научной литературе.

Считаю, что диссертационная работа Сеитова Дастана «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 — физика конденсированного состояния, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а также полностью отвечает требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ», а ее автор Сеитов Дастан заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Рыжков Михаил Владимирович

в.н.с. лаборатории квантовой химии и спектроскопии, доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, старший научный сотрудник

ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского Отделения Российской академии наук (ИХТТ УрО РАН),
620990, ГСП, Российская Федерация, г.Екатеринбург, ул. Первомайская 91,
Телефон: (343)3623554 E-mail:ryz@ihim.uran.ru

26 мая 2023 г.

Подпись М.В.Рыжкова заверяю
Ученый секретарь ИХТТ УрО
к.х.н.



Е.А. Богданова

Я, Рыжков Михаил Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.