

## **ОТЗЫВ**

на автореферат диссертации Сейтова 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 Сейтова посвящена моделированию явлений разупорядочения и переноса в кристаллах  $\text{UO}_2$ ,  $\text{PuO}_2$  и  $\text{ThO}_2$ , используемых в качестве ядерного топлива. Реальное ядерное топливо подвержено интенсивному разупорядочению под воздействием нейтронного облучения, так что изучение подобных процессов актуально для прогнозирования его характеристик в течение эксплуатации и хранения. Метод молекулярной динамики, использованный автором, позволил добиться высокой, по сравнению с первоосновными подходами, производительности моделирования при сохранении приемлемой точности, в результате чего исследовать более сложные и длительные процессы. Получены новые данные о влиянии поверхности на коэффициенты самодиффузии урана, плутония и тория, предложен механизм вакансационной миграции ионов тория в  $\text{ThO}_2$  через междуузельные позиции, изучены механизмы междуузельной диффузии гелия и криптона.

В диссертационной работе проведено моделирование распространения в кристалле  $\text{PuO}_2$  баллистических каскадов с полной энергией 87.7 кэВ. Предложены новые парные потенциалы взаимодействия собственных ионов, гелия и ксенона, применимые в широком диапазоне энергий частиц от 100 кэВ до теплового движения при стандартной температуре. Изучены процессы разрушения такими каскадами ксеноновых и гелиевых кластеров, а также поверхности  $\text{PuO}_2$ .

Достоверность молекулярно-динамического моделирования обеспечена использованием потенциалов взаимодействия, хорошо зарекомендовавших себя в предыдущих работах, а также совпадением результатов с расчетами других авторов и экспериментальными данными там, где сравнение было возможным. Основные результаты опубликованы в изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus (10 статей). Работа имеет теоретическую и практическую значимость, поскольку способствует лучшему пониманию процессов, протекающих в реальном оксидном топливе на атомарном уровне, а также совершенствованию методик моделирования таких процессов.

Замечание по автореферату:

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?

Сделанное замечание не влияет на общую положительную оценку диссертационной работы.

Диссертационная работа Сеитова Дастана «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива» полностью отвечает требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Сеитов Дастан заслуживает присуждения ученой степени кандидат физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

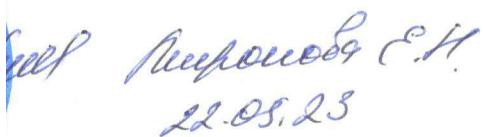
Рисованый Владимир Дмитриевич  
доктор технических наук, профессор  
Научный руководитель АО «Наука и инновации»,  
115035, Москва, Кадашевская набережная, дом 32/2, строение 1  
Тел. +7(499)558-1025, E-mail: VLDRisovanyy@rosatom.ru

Рисованый Владимир Дмитриевич



22 мая 2023 г.

Подпись Рисованого В.Д. заверяю:



Albert Gavrilov 22.05.23