

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 моделированию явлений разупорядочения и переноса в кристаллах UO_2 , PuO_2 и 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 первопринципными 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 вакансионной миграции ионов тория в ThO_2 через междоузельные позиции, изучены механизмы междоузельной диффузии гелия и криптона.

В диссертационной работе проведено моделирование распространения в кристалле 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 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:

Главной



Рисованый В.Д.
22.05.23