

## 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

В диссертационной работе Д. Сеитова методом классической молекулярной динамики изучены процессы дефектообразования и диффузии в кристаллах оксидного ядерного топлива  $UO_2$ ,  $PuO_2$  и  $ThO_2$ . Исследование актуально, поскольку понимание механизмов разупорядочения и переноса в этих кристаллах необходимо как для прогнозирования возможной деградации свойств топлива под воздействием нейтронного облучения, так и для совершенствования технологий восстановления урана, плутония и тория из отработавшего топлива. Расчеты в работе Д. Сеитова были проведены с использованием высокопроизводительных графических процессоров архитектуры CUDA, что позволило получить новые данные за счет увеличения, по сравнению с предыдущими работами, размеров и времен эволюции модельных систем.

Вычислительные эксперименты, поставленные в диссертационной работе, объединены использованием «нулевых» граничных условий, представлявших собой свободную поверхность, изолированную в вакууме. Это позволило рассчитывать коэффициенты диффузии урана, плутония, кислорода, гелия и криптона в присутствии вакансий, рождавшихся на поверхности, а также изучить взаимодействие поверхности  $PuO_2$  с баллистическими каскадами столкновений. Предложены новые потенциалы взаимодействия, применимые для моделирования баллистических каскадов. Основные результаты получены впервые, так что новизна работы не вызывает сомнения.

Достоверность полученных результатов обеспечена использованием проверенных потенциалов взаимодействия, подтверждена физичностью поведения модельных систем, соотнесением результатов с доступными экспериментальными данными, расчетами других авторов. Работа имеет теоретическую и практическую значимость, поскольку может быть основой для дальнейшего моделирования кристаллов элементов ядерного топлива, а полученные в работе данные применимы для прогнозирования поведения таких кристаллов при эксплуатации, хранении и переработке отработавшего ядерного топлива.

Диссертационная работа Сеитова Дастана «Молекулярно-динамическое моделирование разупорядочения и массопереноса в нанокристаллах оксидного ядерного топлива» полностью соответствует 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.

Рахманова Оксана Рашитовна

кандидат физико-математических наук,

старший научный сотрудник лаборатории высокотемпературной электрохимии актинидов и редкоземельных металлов,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук

620066, Свердловская область, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

E-mail: oksana\_rahmanova@mail.ru, Тел.: 8903-084-24-52

Рахманова Оксана Рашитовна

29 мая 2023 г.

Подпись Рахмановой О.Р. заверяю:



Ученый секретарь ИВТЭ Ур

А.О. Кодинцева