

Ламуева Марина Владимировна

**ВЕРИФИКАЦИЯ РАЗРЕЗОВ МНОГОМЕРНЫХ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ
И ПОЛИЭДРАЦИЯ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ В
ЗАДАЧАХ РАЗРАБОТКИ МАТЕРИАЛОВ
РАСПЛАВНО-СОЛЕВОГО РЕАКТОРА
4-ГО ПОКОЛЕНИЯ**

1.3.8 - физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Улан-Удэ - 2021

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФМ СО РАН)

Научный руководитель:

Луцык Василий Иванович
доктор химических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Захаров Максим Анатольевич
доктор физико-математических наук, доцент,
профессор кафедры физики твердого тела и микроэлектроники Института электронных и информационных систем ФГБОУ ВО «Новгородский государственный университет им. Ярослава Мудрого» (ФГБОУ ВО "НовГУ"), Великий Новгород

Богданов Александр Иванович
кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник ФГБУН Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук (ИГХ СО РАН), Иркутск

Ведущая организация:

Федеральное государственное унитарное предприятие "Научно-исследовательский технологический институт имени А.П. Александрова" (ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова»), Ленинградская область, Сосновый Бор

Защита состоится «24» декабря 2021 г. в 15.00 часов на заседании диссертационного совета Д 24.2.306.01 при ФГБОУ ВО "Иркутский государственный университет" по адресу: 664003, Иркутск, бульвар Гагарина, 20.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Иркутского государственного университета и на сайте <http://www.isu.ru>.

Автореферат разослан « ____ » _____ 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, профессор

Ю.В.Аграфонов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность.

Расплавно-солевой реактор (Molten Salt Reactor) является одной из концепций IV поколения ядерных реакторов, работающих на расплавно-солевых топливных композициях. Согласно существующим правилам отбора, основу таких композиций составляют фториды металлов с небольшим сечением захвата нейтронов. Хотя хлоридные системы имеют более высокое давление пара и низкую термодинамическую стабильность при высоких температурах по сравнению с фторидами, но они являются менее агрессивными по отношению к структуре материала и обладают более низкими точками плавления. При этом они могут использоваться только в быстрых реакторах, но не в тепловых. Поэтому для обеспечения надежной эксплуатации реакторов нового поколения необходима исчерпывающая информация о химических процессах и равновесиях как фторидных и хлоридных, так и во фторид-хлоридных взаимных системах. Одним из необходимых условий реализации концепции ядерной энергетики нового поколения является выявление закономерностей, позволяющих прогнозировать изменение физико-химических свойств фторид-хлоридных систем по мере накопления продуктов ядерных превращений. Такие закономерности удобно извлекать из информации о фазовых равновесиях, накопленной в многокомпонентных фазовых диаграммах этих систем.

Так как экспериментальные исследования и термодинамический расчет не являются достаточными условиями для того, чтобы фазовая диаграмма могла стать реальным рабочим инструментом материалововеда (технолога) и позволила бы ему открывать закодированные в них сведения о результатах взаимодействия исходных компонентов, то необходима сборка многомерной фазовой диаграммы из соответствующих (гипер)поверхностей или фазовых областей (<http://ipms.bscnet.ru/labs/skkm.html>).

Для получения информации о результатах взаимодействия в исследуемых системах необходима полная модель диаграммы, включающая не только ликвидус, не только фазовые области с участием расплава, но и твердофазные области, что и определяет *актуальность проведенного исследования*.

Цель работы состоит в разработке методологии исследования многокомпонентных фторидных, хлоридных и фторид-хлоридных взаимных систем для подбора оптимальных составов, удовлетворяющих требованиям концепции жидко-солевого ядерного реактора 4-го поколения.

Для достижения поставленной цели решались следующие **задачи**:

1. Построение пространственных компьютерных моделей T-x-y и T-x-y-z диаграмм фторидных, хлоридных и фторид-хлоридных систем, образующихся при полиэдрации многокомпонентных концентрационных комплексов, в которых предусмотрены возможности построения любых произвольно заданных изо- и политермических разрезов и расчетов материальных балансов сосуществующих фаз на всех этапах кристаллизации.

2. Разработка методики построения схем ди-, моно- и нонвариантных состояний для вывода и описания геометрического строения T-x-y-z диаграмм четырехкомпонентных систем.

Научная новизна работы.

1. Показано, что пространственные компьютерные модели Т-х-у и Т-х-у-з диаграмм можно использовать для проверки достоверности результатов термодинамических расчетов и построенных по экспериментальным данным изотермических и политермических разрезов.

2. Формализация геометрического строения Т-х-у-з диаграмм в виде схем ди-, моно- и нонвариантных состояний позволила выполнить прогноз топологических типов фазовых диаграмм и возможных фазовых превращений в четверных системах при минимуме экспериментальных данных.

Практическая значимость работы.

1. Повышение сложности геометрического строения 3D моделей Т-х-у диаграмм (количество бинарных соединений, количество поверхностей и фазовых областей) фторидных систем происходит в такой последовательности: LiF-NaF-CaF₂ (0;35;17), LiF-CaF₂-LaF₃ (0;47;20), LiF-NaF-LaF₃ (1;47;20), NaF-CaF₂-LaF₃ (1;74;28). Аналогично, для хлоридных систем: UCl₃-NaCl-PuCl₃ (0;9;6), UCl₃-MgCl₂-PuCl₃ (0;9;6), UCl₃-NaCl-MgCl₂ (2;66;27), NaCl-MgCl₂-PuCl₃ (2;66;27).

2. Прототипирование разборных фазовых диаграмм тройных систем, с целью верификации результатов интерпретации экспериментальных данных и термодинамических расчетов в процессе цифровизации материаловедения, становится более эффективным и корректным, если к нему применить специально для этого разработанную технологию подготовки технических заданий в сочетании Excel+AutoCAD.

3. В результате сборки 4D компьютерных Т-х-у-з диаграмм четверных систем UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃ и LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ показано, что хлоридная система состоит из 66-ти гиперповерхностей и 30-ти фазовых областей, а фторидная – из 169-ти гиперповерхностей и 62-х фазовых областей. Для фторида кальция даны границы фазовых областей с участием двух его полиморфных модификаций.

4. Тетраэдрация четверной взаимной системы Li,Na,U||F,Cl с конгруэнтно плавящимися соединениями 3NaF·UF₄ (R1) и 7NaF·6UF₄ (R2), в зависимости от стабильности диагонали в системе Li,U||F,Cl, реализуется в одном из трех вариантов (еще один гипотетический вариант – четвертый – невозможен из-за отсутствия плоскости для скрещивающихся диагоналей). Каждый из этих вариантов дает по пять четверных систем, причем четыре из них повторяются. Сложность ликвидуса в 11-ти итоговых четверных системах возрастает в ряду LiF-NaF-NaCl-R1, LiF-UF₄-NaCl-UCl₃, LiF-UF₄-NaCl-R2, LiF-LiCl-NaCl-UCl₃, LiF-NaCl-R1-R2, LiF-UCl₃-R1-R2, LiF-NaF-NaCl-UCl₃, LiF-NaF-UCl₃-R1, LiF-UF₄-UCl₃-R2, LiF-UF₄-LiCl-NaCl, UF₄-LiCl-NaCl-UCl₃ с увеличением числа гиперповерхностей с трех до девяти.

Методология и методы диссертационного исследования.

При построении пространственных компьютерных моделей фазовых диаграмм трех и четырехкомпонентных солевых систем использовалась методика вывода геометрического строения Т-х-у и Т-х-у-з диаграмм из схем (ди- для четверных), моно- и нонвариантных состояний, построения прототипа и после-

дующего его превращения в 3D или в 4D, соответственно, модель реальной системы, разработанная сотрудниками сектора компьютерного конструирования материалов ИФМ СО РАН. Для построения фазовых диаграмм и соответствующих им диаграмм материального баланса использовались программы "Редактор фазовых диаграмм" (PD Editor) и "Конструктор фазовых диаграмм" (PD Designer).

Диссертационная работа выполнена в соответствии с тематическим планом фундаментальных исследований Института физического материаловедения СО РАН: проект 0336-2019-0008 "Физические характеристики, структурные особенности и функциональные свойства композитных материалов" (государственная регистрация № 01201366187) (2017-2020) и проект 0270-2021-0002 "Физические характеристики, особенности строения, фазовые диаграммы и функциональные свойства композитных структур и материалов" (государственная регистрация № 121033000126-5) (2021-2023), а также при финансовой поддержке РФФИ: проект № 19-38-90035 Аспиранты "Полиэдрация концентрационных комплексов и верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм в задачах разработки материалов расплавленно-солевого реактора 4-го поколения" (2019-2021).

На защиту выносятся:

1. Усложнение 3D моделей T-x-y диаграмм (количество бинарных соединений, количество поверхностей и фазовых областей) четырех фторидных тройных систем происходит в такой очередности: LiF-NaF-CaF₂ (0;35;17), LiF-CaF₂-LaF₃ (0;47;20), LiF-NaF-LaF₃ (1;47;20), NaF-CaF₂-LaF₃ (1;74;28). Аналогично, для хлоридных систем: UCl₃-NaCl-PuCl₃ (0;9;6) и UCl₃-MgCl₂-PuCl₃ (0;9;6), а также UCl₃-NaCl-MgCl₂ (2;66;27) и NaCl-MgCl₂-PuCl₃ (2;66;27).

2. В результате сборки 4D компьютерных T-x-y-z диаграмм четверных систем UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃ и LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ показано, что хлоридная система состоит из 66-ти гиперповерхностей и 30-ти фазовых областей, а фторидная – из 169-ти гиперповерхностей и 62-х фазовых областей. Для фторида кальция даны границы фазовых областей с участием двух его полиморфных модификаций.

3. Тетраэдрация четверной взаимной системы Li,Na,U||F,Cl с конгруэнтно плавящимися соединениями 3NaF·UF₄ (R1) и 7NaF·6UF₄ (R2), в зависимости от стабильности диагонали в системе Li,U||F,Cl, реализуется в одном из трех вариантов (еще один гипотетический вариант – четвертый – невозможен из-за отсутствия плоскости для скрещивающихся диагоналей). Каждый из этих вариантов дает по пять четверных систем, причем четыре из них повторяются. Сложность ликвидуса в 11-ти итоговых четверных системах возрастает в ряду LiF-NaF-NaCl-R1, LiF-UF₄-NaCl-UCl₃, LiF-UF₄-NaCl-R2, LiF-LiCl-NaCl-UCl₃, LiF-NaCl-R1-R2, LiF-UCl₃-R1-R2, LiF-NaF-NaCl-UCl₃, LiF-NaF-UCl₃-R1, LiF-UF₄-UCl₃-R2, LiF-UF₄-LiCl-NaCl, UF₄-LiCl-NaCl-UCl₃, с увеличением числа гиперповерхностей от трех до девяти.

4. Прототипирование разборных фазовых диаграмм тройных систем с целью верификации результатов интерпретации экспериментальных данных и термодинамических расчетов в процессе цифровизации материаловедения ста-

новится более эффективным и корректным, если к нему применить специально для этого разработанную технологию подготовки технических заданий в сочетании Excel+AutoCAD.

Личный вклад автора.

Автором построены все 3D и 4D компьютерные модели фазовых диаграмм фторидных и хлоридных систем, описанные в диссертации в главах 2 и 3. При этом использовались программы PD Editor и PD Designer (авторы Э.Р. Насрулин и А.М. Зырянов). Изложенные в диссертации результаты получены автором или вместе с сотрудниками сектора компьютерного конструирования материалов института физического материаловедения СО РАН.

Степень достоверности и апробация результатов.

Достоверность и обоснованность построенных 3D и 4D компьютерных моделей фазовых диаграмм подтверждается сопоставлением с экспериментальными изо- и политермическими разрезами и проекциями ликвидуса. Корректность их геометрического строения подтверждается выполнением основных положений геометрической термодинамики (правила фаз, принципов соответствия и непрерывности, правила о соприкасающихся пространствах состояния).

Основные результаты работы были представлены и обсуждались на международных и российских конференциях: XV, XVII, XVIII конференции по фундаментальным и прикладным проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов) (Улан-Удэ, 2018, 2020, 2021); V, VI научные конференции с международным участием "Геометрия многообразий и её приложения", посвященная 100-летию профессора Р.Н. Щербакова (Улан-Удэ, 2018, 2020); IX международной конференции по материаловедению (IX International Conference on Materials Science (ICMS2020)) (Улан-Батор, Монголия, 2020); национальной научно-практической конференции "Образование и наука" (Улан-Удэ, 2020); 10th Global Conference on Materials Science and Engineering (CMSE 2021).

Публикации. Основное содержание работы изложено в 48 публикациях, в том числе в 23 статьях, опубликованных в журналах, рекомендованных ВАК (РИНЦ, Scopus, Web of Science), в том числе 2 - в журналах, входящих в систему цитирования Web of Science.

Гранты. Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ проектами № 14-08-31468 мол_а "Расплавы фторид-хлоридных взаимных систем для реактора 4-го поколения: дизайн легкоплавких составов" (2014-2015) и № 17-08-00875 а "Сборка компьютерных 4D моделей T-x-y-z диаграмм, формирующих пяттерную систему Fe-Ni-Cu-Co-S, для модернизации технологических процессов получения никеля, кобальта и меди" (2017-2019).

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы (глава 1); описания сборки 4D компьютерных моделей T-x-y-z диаграмм LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ (глава 2) и UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃ и 3D компьютерных моделей T-x-y диаграмм формирующих их тройных систем (глава 3); изложения результатов полиэдрации четверной фторид-хлоридной взаимной системы Li,Na,U||F,Cl для получения материалов как топлива ядерных реакторов IV поколения и представления 4D компьютерных моделей T-x-y-z диаграмм получаемых подсистем (глава 4);

описания технологии Excel+AutoCAD для разработки технических заданий для прототипирования разборных Т-х-у диаграмм (глава 5); обсуждения результатов, выводов, списка цитируемой литературы (126 наименований) и пяти Приложений. Работа изложена на 125 страницах печатного текста, включая 58 рисунков и 23 таблицы (в том числе 27 рисунков и 3 таблицы в Приложениях).

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении кратко обоснована актуальность работы и степень разработанности темы, сформулированы цель и задачи исследования, а также основные положения, выносимые на защиту. Показаны научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

В первой главе на основании литературного обзора сформулированы задачи, решение которых необходимо для построения компьютерных моделей фазовых диаграмм трех- и четырехкомпонентных фторид-хлоридных систем, способных строить любые разрезы и на всех этапах кристаллизации выполнять расчеты материальных балансов сосуществующих фаз.

Минимальной экспериментальной информацией для построения моделей тройных и четверных систем являются данные о строении ликвидуса и ограничивающих бинарных систем. После анализа экспериментальных данных разрабатываются схемы моно- и невариантных равновесий. На основе этих схем в программе воспроизводятся (гипер)поверхности ликвидуса, солидуса, сольвуса, невариантные (гипер)плоскости и линейчатые (гипер)поверхности, формируются фазовые области.

К каждой фазовой диаграмме составляется подробный отчет, содержащий:

- начальные данные для построения модели (координаты бинарных, тройных и четверных точек, содержащихся на контуре поверхностей ликвидуса; координаты соединений);
- схему моно- невариантных состояний;
- визуализацию фазовой диаграммы в пространстве и проекции;
- список (гипер)поверхностей и фазовых областей;
- горизонтальные и вертикальные разрезы (если имеются экспериментальные или рассчитанные термодинамическими методами разрезы, то будет проведено их сопоставление);
- таблицы с перечнем фазовых превращений и наборов микроструктурных элементов для концентрационных полей диаграммы;
- диаграммы материального баланса для выборочных составов, содержащие информацию об этапах кристаллизации и соотношении долей фаз, выделившихся в различных фазовых областях фазовой диаграммы.

Решения сформулированных задач сгруппированы в трех главах, что и обусловило структуру диссертации:

- 4D модель Т-х-у-*z* диаграммы LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ и тройных систем, ее формирующих;
- 4D модель Т-х-у-*z* диаграммы UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃ и формирующих ее тройных систем;
- полиэдрация Li,Na,U||F,Cl: - прототипирование разборных Т-х-у диаграмм (разработка технических заданий для Excel+AutoCAD-технологии).

Для каждой исследуемой системы результаты анализа исходных экспериментальных (или опубликованных расчетных) данных сводятся в схему мо-

но- и неинвариантных состояний (расширенная форма записи схемы фазовых реакций Шейла). На основании схемы делается вывод о геометрическом строении каждой Т-х-у диаграммы, то есть выводится количество и тип всех поверхностей и фазовых областей. Табличная форма схемы переводится в графическую трехмерную, на которой формально изображены трехфазные области и плоскости, соответствующие четырехфазным неинвариантным превращениям. Постройка на графическую схему нелинейчатых поверхностей превращает ее в прототип фазовой диаграммы, который, по мере введения экспериментально определенных координат (состав-температура) базовых точек и уточнения кризисных линий и поверхностей становится 3D моделью Т-х-у диаграммы реальной системы.

Во второй главе получено обобщенное геометрическое описание тройных систем, формирующих четырехкомпонентную систему $\text{LiF-NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$. Для этого построены пространственные компьютерные модели всех четырех тройных систем (рис. 1) и проведен прогноз Т-х-у-з диаграммы этой фторидной системы.

Этапы разработки 3D модели можно проследить по системе $\text{NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$ (В-С-D). На первом шаге формируется схема моно- и неинвариантных состояний этой системы (табл. 1). Такая схема является основой для описания всех поверхностей Т-х-у диаграммы и ее фазовых областей.

Затем табличная схема переводится в графическую трехмерную форму (рис. 2а-в), на которой размещаются плоскости, соответствующие неинвариантным реакциям, и примыкающие к ним линейчатые поверхности - границы трехфазных областей. Далее на базе полученной 3D схемы строится прототип Т-х-у диаграммы, в котором точки разнесены по составам и температурам с сохранением топологического типа изучаемой системы (рис. 2г). После ввода в прототип реальных координат (составов и температур) он трансформируется в окончательную 3D модель Т-х-у диаграммы (рис. 2д-е).

При построении моделей использовались данные статьи [1], в которой фторид кальция обладает двумя полиморфными модификациями (С и С1 в табл. 1). Этот факт опровергается другими исследователями, например, [2]. Однако в подобных случаях противоречивости мнений пространственные модели, в отличие от термодинамических, тесно привязанных к конкретным физическим параметрам компонентов, тем и хороши, что позволяют рассматривать различные, в том числе и спорные, варианты геометрического строения фазовых диаграмм и корректируются после ввода в них окончательно выверенных данных. Так, в случае отрицания полиморфизма у CaF_2 , Т-х-у диаграмма $\text{NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$ (табл. 1) станет проще, "потеряв" несколько поверхностей.

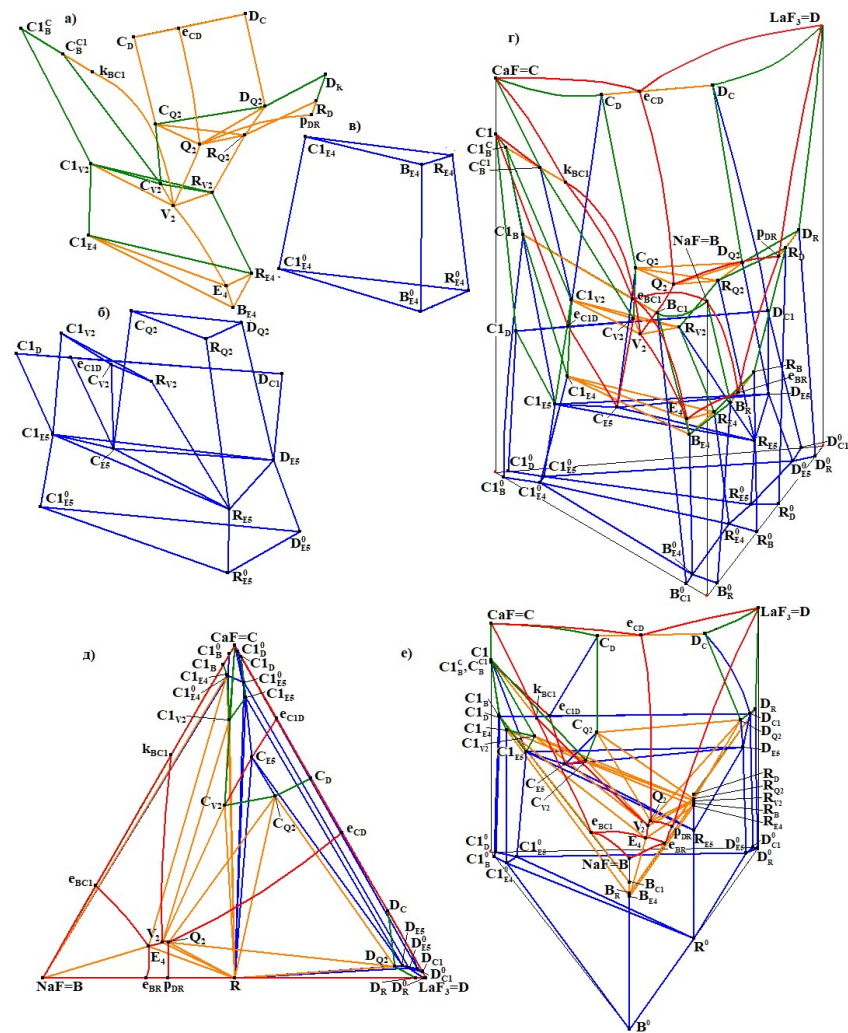


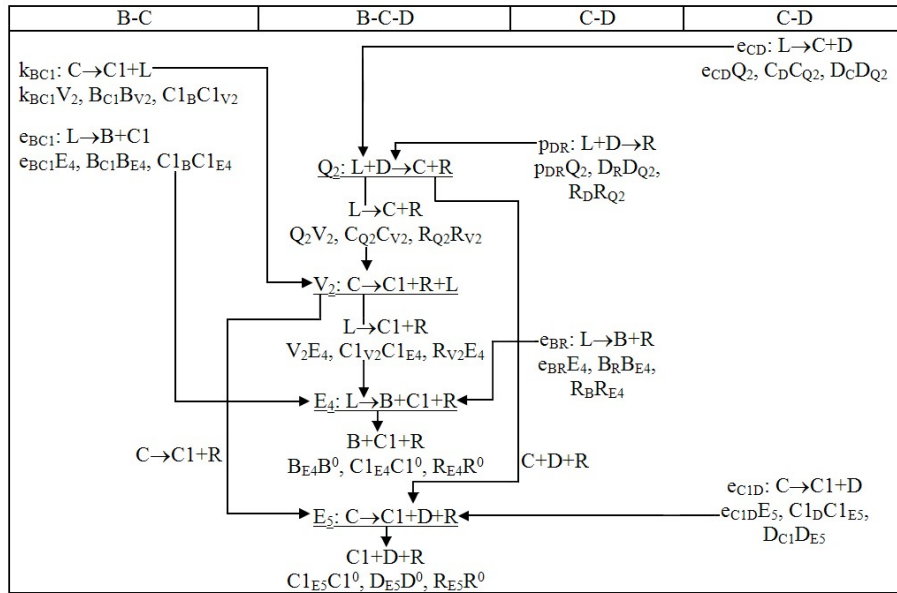
Рис. 2. Фрагменты 3D схемы моно- и невариантных состояний, относящиеся к ликвидусу (а) и субсолидусу (б-в), прототип (г), х-у проекция (д), 3D компьютерная модель Т-х-у диаграммы реальной системы NaF-CaF₂-LaF₃ (B-C-D) (е)

В таком случае, в состав Т-х-у-з диаграммы входят: - по 6 гиперповерхностей ликвидуса (рис. 3) и солидуса; - 11 пар гиперповерхностей сольвуса (всего – 22); - 2 гиперповерхности трансуса; - 22 триады линейчатых гиперповерхностей с образующим отрезком (всего – 66); - 52 линейчатых гиперповерхности с образующей плоскостью; - 3 комплекса, соответствующих невариантным превращениям ν , π , ϵ , каждый из которых состоит из пяти горизонтальных (изотермических) гиперплоскостей.

Таблица 1

Схема моно- и невариантных состояний Т-х-у диаграммы NaF-CaF₂-LaF₃ (B-C-D) с инконгруэнтно плавящимся соединением NaLaF₄ (R) (рис. 2),

$D > C > e_{CD} > k_{BC1} > B > e_{BC1} > p_{DR} > Q_2 > V_2 > e_{BR} > e_{C1D} > E_4 > E_5$

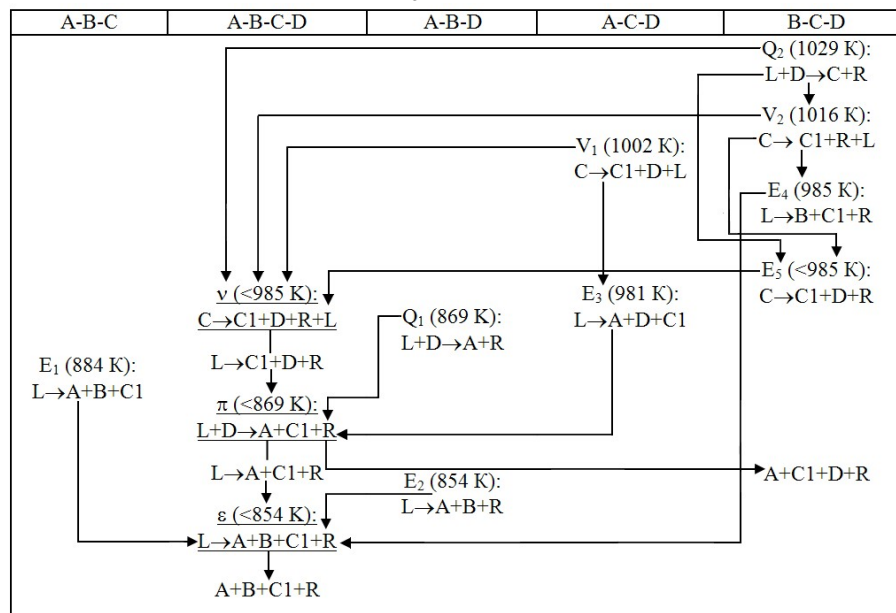


Все эти 169 гиперповерхностей служат границами 62-х фазовых областей: - 6 однофазных областей I (A, B, C, C1, D, R) и 6 двухфазных L+I; - 12 двухфазных областей I+J без расплава (A+B, A+C1, A+D, A+R, B+C1, B+R, C+D, C+R, C+C1, C1+D, C1+R, D+R) и 12 трехфазных областей с расплавом L+I+J; - 10 трехфазных областей I+J+K без расплава (A+B+C1, A+B+R, A+C1+D, A+C1+R, A+D+R, B+C1+R, C+C1+D, C+C1+R, C+D+R, C1+D+R) и 10 четырехфазных областей с расплавом L+I+J+K; - 3 четырехфазные области без расплава A+B+C1+R, A+C1+D+R, C+C1+D+R и 3 пятифазные, вырожденные в плоские гиперплоскости L+A+B+C1+R, L+A+C1+D+R, L+C+C1+D+R.

Таблица 2

Схема фазовых реакций для T-x-y-z диаграммы LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ (A-B-C-D) с инконгруэнтно плавящимся соединением (R) (рис. 3),

$D > C > e_{CD} > k_{AC1} = k_{BC1} > B > A > e_{BC1} > p_{DR} > e_{AD} > e_{AC1} > Q_2 > V_2 > e_{BR} > V_1 > e_{C1D} > E_4 > E_3 > e_{AB} > E_1 > Q_1 > E_2 > E_5 > v > \pi > \epsilon$



Конечно, окончательное подтверждение (или опровержение) прогноза мо-

жет дать только эксперимент.

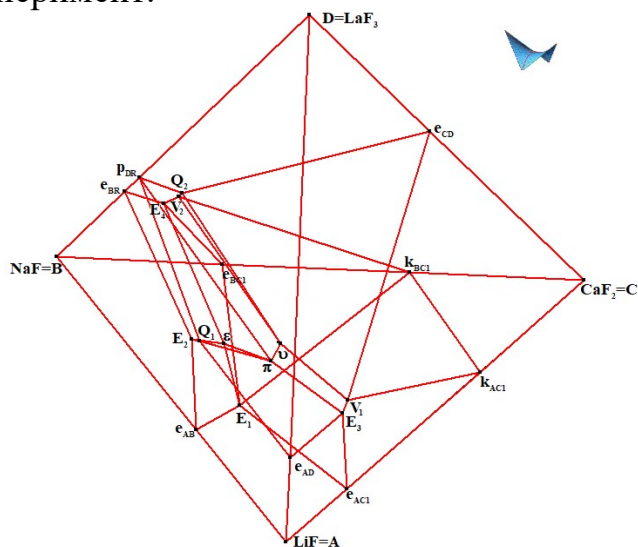
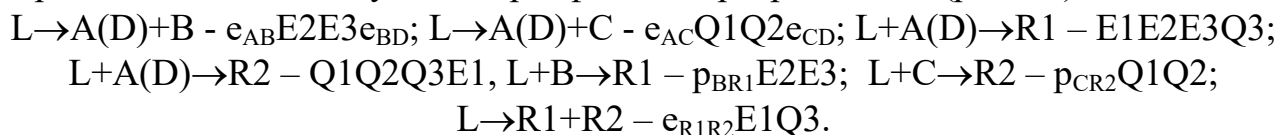


Рис. 3. Прототип ликвидуса: x-y-z проекция T-x-y-z диаграммы LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ (A-B-C-D)

В третьей главе представлена 4D компьютерная модель T-x-y-z диаграммы хлоридов урана, натрия, магния и плутония и четыре 3D компьютерные модели T-x-y диаграмм формирующих ее систем. На основе данных о строении ограничивающих тройных систем построена 4D модель прототипа (рис. 4) T-x-y-z диаграммы и далее – 4D модель T-x-y-z диаграммы реальной системы UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃ (A-B-C-D) (рис. 5).

В этой системе отсутствуют неинвариантные пятифазные превращения, а есть только три моновариантных превращения, которым на ликвидусе соответствуют линии Q₁Q₂, E₁Q₃, E₂E₃ (с максимумом в точке E). По каждой из них пересекаются три поверхности, так что T-x-y-z диаграмма состоит из семи поверхностей, соответствующих трехфазным превращениям (рис. 4а):



По этим семи поверхностям, в свою очередь, пересекаются пять гиперповерхностей ликвидуса компонентов NaCl (B) и MgCl₂ (C), соединений Na₂MgCl₄ (R₁) и NaMgCl₃ (R₂), а также твердого раствора UCl₃(PuCl₃) или A(D). Им соответствуют пять гиперповерхностей солидуса (рис. 4б).

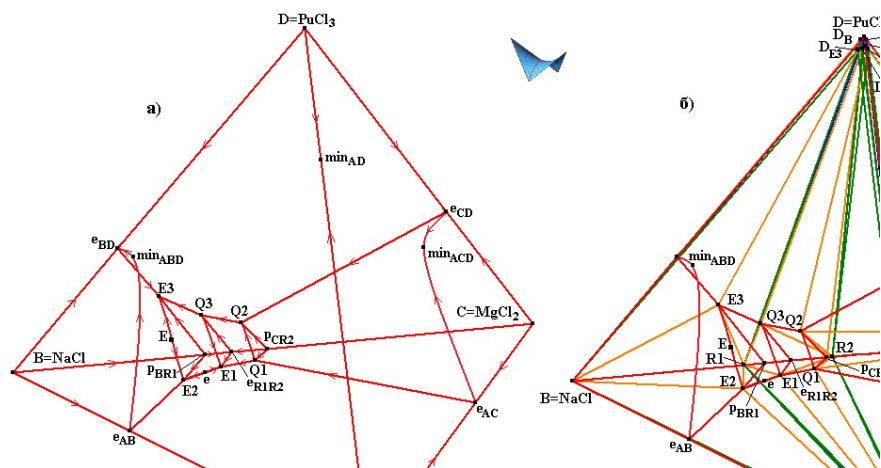


Рис. 4. Т-х-у-з диаграмма UCl_3 - $NaCl$ - $MgCl_2$ - $PuCl_3$ (A-B-C-D) с бинарными инконгруэнтно плавящимися соединениями Na_2MgCl_4 (R1), $NaMgCl_3$ (R2): х-у-з проекции гиперповерхностей ликвидуса (а) и всех гиперповерхностей (б)

Каждой из перечисленных семи поверхностей на пересечении двух гиперповерхностей ликвидуса можно найти соответствие на сопряженных им гиперповерхностям солидуса. Так, поверхности $e_{AB}E_2E_3e_{BD}$, по которой пересекаются гиперповерхности ликвидуса A(D) и B (рис. 4а), соответствуют поверхности, принадлежащие гиперповерхностям солидуса A(D) и B: $A_BA_{E_2}D_{E_3}D_B$ и $B_A B_{E_2}B_{E_3}B_D$ (рис. 4б). Эти три поверхности попарно являются направляющими трех линейчатых гиперповерхностей с образующим отрезком, которые, в итоге, образуют триаду поверхностей - границ трехфазной области $L+A(D)+B$. Всего таких триад – 7 (а линейчатых гиперповерхностей с образующим отрезком – в три раза больше, то есть 21).

Каждой из трех линий Q_1Q_2 , Q_3E_1 , E_2E_3 , по которым пересекаются по три гиперповерхности ликвидуса, соответствуют три моновариантные линии на гиперповерхностях солидуса (рис. 4б). Например, линии Q_1Q_2 на пересечении гиперповерхностей ликвидуса A(D), C, R2 (рис. 4а) можно найти на соответствующих гиперповерхностях солидуса (рис. 4б) линии $A_{Q_1}D_{Q_2}$, $C_{Q_1}C_{Q_2}$, $R2_{Q_1}R2_{Q_2}$. Три из четырех линий становятся направляющими линейчатых гиперповерхностей с образующей плоскостью. Так что в итоге формируются четыре линейчатые гиперповерхности, в границах которых заключена фазовая область $L+A(D)+C+R2$. Всего на Т-х-у-з диаграмме таких тетрад три. Границами семи двухфазных областей - $A(D)+B$, $A(D)+C$, $A(D)+R1$, $A(D)+R2$, $B+R1$, $C+R2$, $R1+R2$ - служат семь пар гиперповерхностей сольвуса. И еще три триады линейчатых гиперповерхностей с образующим отрезком объединяются в границы фазовых областей без расплава: $A(D)+B+R1$, $A(D)+C+R2$, $A(D)+R1+R2$.

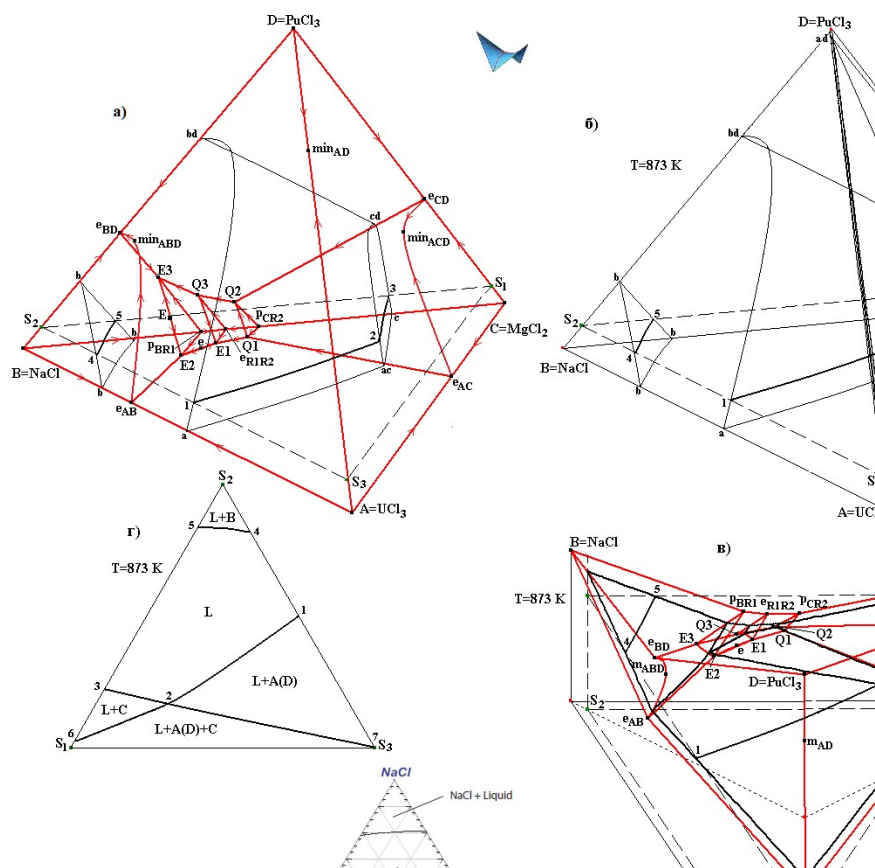


Рис. 5. Изотермический $T=873$ К (б) и политермический $S_1(0, 0, 0, 93, 0, 07)-S_2(0, 0, 93, 0, 0, 0, 07)-S_3(0, 93, 0, 0, 0, 0, 07)$ (в) 3D разрез T - x - y - z диаграммы системы $UCl_3-NaCl-MgCl_2-PuCl_3$ (A-B-C-D) (а); сечение плоскостью $z_4(PuCl_3)=0.07$ 3D разреза 873 К совпадает с сечением плоскостью $T=873$ К 3D разреза $z_4(PuCl_3)=0.07$ (г) $T=873$ К и соответствует термодинамически рассчитанному разрезу [3] (д)

После построения прототипа и анализа схемы фазовых реакций можно сделать вывод, что в целом, T - x - y - z диаграмма состоит из 66-ти гиперповерхностей: 5 пар ликвидус-солидус, 14 - сольвуса, 21 линейчатая гиперповерхность с образующим отрезком для огранения трехфазных областей с расплавом и еще 9 границ трехфазных областей без расплава, 12 линейчатых гиперповерхностей с образующей плоскостью и 30 фазовых областей: по 5 однофазных $I=A(D)$, B, C, R1, R2 и двухфазных с расплавом $L+I$; по 7 трехфазных с расплавом $L+A(D)+B$, $L+A(D)+C$, $L+A(D)+R1$, $L+A(D)+R2$, $L+B+R1$, $L+C+R2$, $L+R1+R2$ и двухфазных с теми же фазами, но без расплава; по 3 четырехфазных $L+A(D)+B+R1$, $L+A(D)+C+R2$, $L+A(D)+R1+R2$ с расплавом и трехфазные без расплава.

После ввода в прототип реальных координат (составов и температур) базовых точек выясняется, что вырождаются: из 5-ти гиперповерхностей солидуса – 4 (невырожденной остается гиперповерхность солидуса, соответствующая окончанию первичной кристаллизации твердого раствора $UCl_3(PuCl_3)$ или A(D); из 14-ти гиперповерхностей сольвуса невырожденными остаются только те 4, которые служат границами двухфазных областей $A(D)+B$, $A(D)+C$, $A(D)+R1$, $A(D)+R2$ с областью гомогенности твердого раствора A(D); 3 линейчатые гиперповерхности с образующим отрезком, которые разделяют между собой области $L+B+R1$ и $B+R1$, $L+C+R2$ и $C+R2$, $L+R1+R2$ и $R1+R2$, и еще три линей-

чатые гиперповерхности тоже с образующим отрезком, которые находятся на границах областей $A(D)+B+R1$ и $B+R1$, $A(D)+C+R2$ и $C+R2$, $A(D)+R1+R2$ и $R1+R2$. Отсюда очевидно, что фазовые области $R1+R2$, $C+R2$, $B+R1$ сливаются с соответствующим ребром концентрационного тетраэдра, области B и C – с его вершинами, области $R1$ и $R2$ – с точками на ребре BC . В результате, 4D компьютерная модель T - x - y - z диаграммы (рис. 4) позволяет воспроизводить 2D разрезы и строить любые произвольно заданные 3D разрезы и их 2D сечения (рис. 5), в том числе для того, чтобы верифицировать и далее - оценить адекватность модели, понять особенности геометрического строения T - x - y - z диаграммы.

Для оценки адекватности полученной 4D модели проводится сравнение ее разрезов с точно такими же разрезами, полученными из экспериментов, либо рассчитанных термодинамически. Например, в [3] показан 2D изотермический разрез при $T=873$ К на сечении концентрационного тетраэдра плоскостью при постоянном содержании $PuCl_3$, равном 0.07 мол. долей (рис. 5д). Для воспроизведения этого разреза PD Designer может действовать по одному из двух сценариев. Во-первых, он может построить тетраэдр, соответствующий изотермическому разрезу при 873 К (рис. 5б), а затем рассечь этот тетраэдр плоскостью $S_1S_2S_3$, параллельной основанию тетраэдра при 0.07 мол. долей $PuCl_3$. На 3D изотермическом разрезе (рис. 5б) появляются поверхности a - bd - cd - ac , bbb и ac - cd - c – как сечения гиперповерхностей $UCl_3(PuCl_3)$ или $A(D)$, $NaCl$ (B) и $MgCl_2$, соответственно. Кроме них, на разрезе можно увидеть поверхности a - ac - cd - ad и ac - cd - C - сечения линейчатых гиперповерхностей, которые служат границами трехфазной области $L+A(D)+C$. После того, как 3D изотермический разрез пересекается плоскостью $S_1S_2S_3$, на перечисленных поверхностях остаются следы: на a - bd - cd - ac – линия 1-2, на bbb – линия 4-5, на ac - cd - c – линия 2-3, а на поверхностях a - ac - cd - ad и ac - cd - C , соответственно, линии 2-7 и 2-6. Эти же линии остаются на 2D сечении (рис. 5г). Второй вариант – пересечь при 0.07 мол. долей $PuCl_3$ исходный концентрационный тетраэдр, а затем ортогонально полученному треугольнику $S_1S_2S_3$ восстановить температурную ось и в полученных координатах построить все гиперповерхности T - x - y - z диаграммы (рис. 5в). Далее полученная трехмерная фигура пересекается изотермической плоскостью при 873 К. В этом случае, получается то же 2D сечение четырехмерного объекта – T - x - y - z диаграммы системы UCl_3 - $NaCl$ - $MgCl_2$ - $PuCl_3$ (рис. 5в).

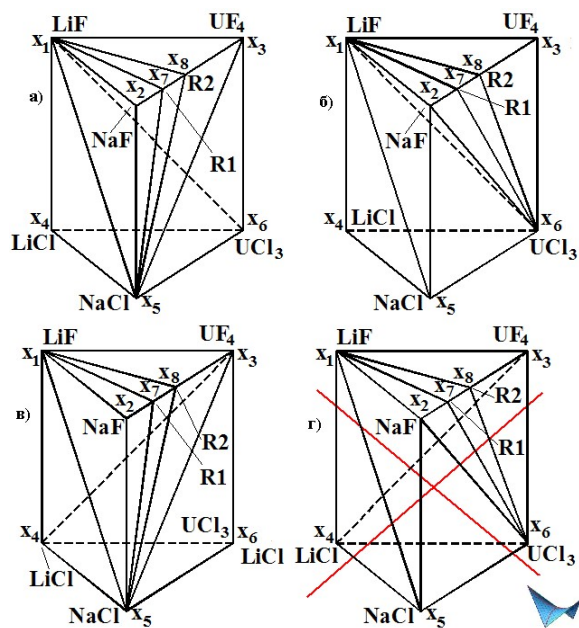


Рис. 6. Варианты полиэдрации системы $\text{Li, Na, U} \parallel \text{F, Cl}$ с конгруэнтно плавящимися соединениями $\text{R1} = 3\text{NaF} \cdot \text{UF}_4$ (x_7) и $\text{R2} = 7\text{NaF} \cdot 6\text{UF}_4$ (x_8) при условии стабильности во взаимной системе $\text{Li, Na} \parallel \text{F, Cl}$ диагонали LiF-NaCl

В четвертой главе рассмотрены результаты полиэдрации четверной взаимной системы $\text{Li, Na, U} \parallel \text{F, Cl}$. Среди бинарных систем фторидов или хлоридов щелочных металлов и урана (плутония) все фторидные системы, формирующие тройные системы $\text{M1, M2, U(Pu)} \parallel \text{F}$ ($\text{M1, M2} = \text{Li, Na, K, Rb}$) экспериментально изучены более или менее детально.

Хлоридные системы $\text{M1, M2, U(Pu)} \parallel \text{Cl}$ ($\text{M1, M2} = \text{Li, Na, K, Rb}$) изучены намного хуже. И совсем отсутствует информация об изученности тройных взаимных систем $\text{M, U(Pu)} \parallel \text{F, Cl}$ ($\text{M} = \text{Li, Na, K, Rb}$). Поэтому особый интерес представляют именно взаимные фторид-хлоридные системы, одна из которых рассмотрена в данной работе. Для системы $\text{Li, Na, U} \parallel \text{F, Cl}$ конструирование 4D компьютерных моделей T-x-y-z диаграмм получаемых подсистем на данный момент является виртуальным, а ее полиэдрация - только мультивариантной. Из четырех полученных вариантов один оказался невыполнимым (рис. 6), а в остальных трех получены по пять 4D T-x-y-z диаграмм (рис. 7).

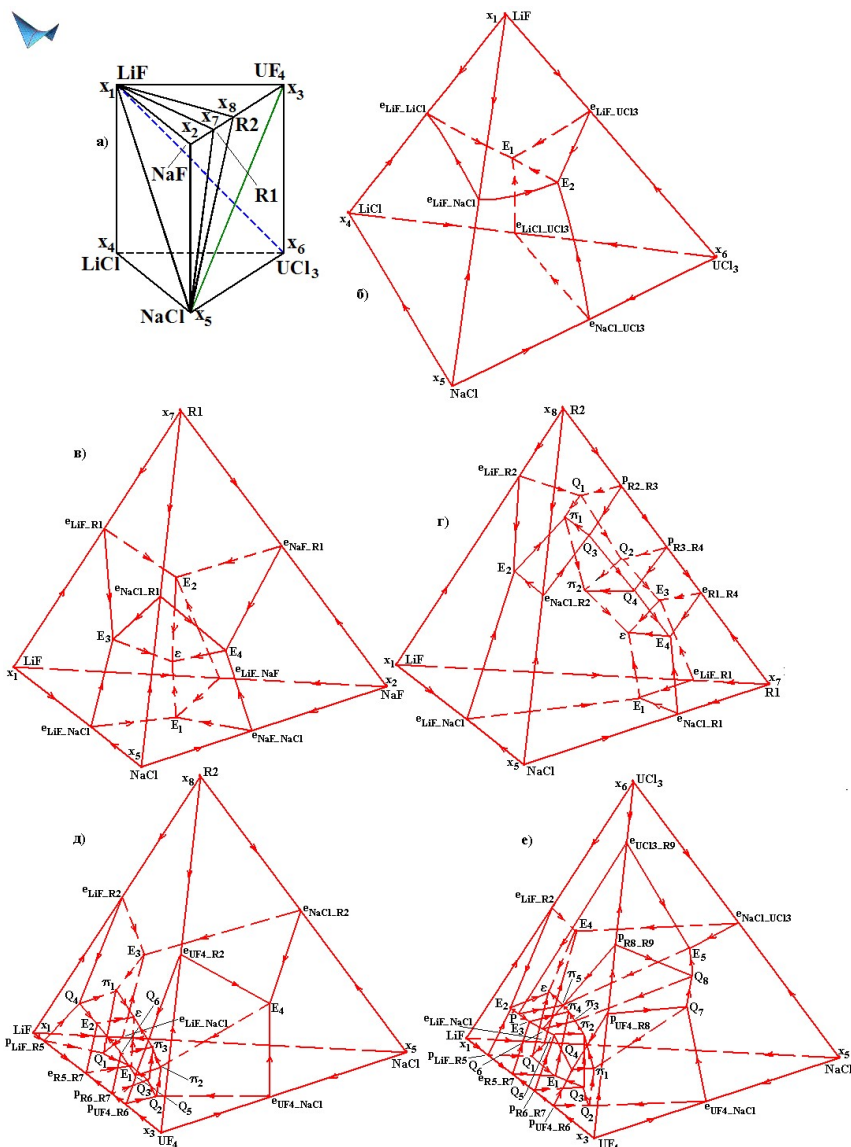


Рис. 7. Полиэдрация со стабильными диагоналями LiF- UCl_3 и NaCl- UF_4 (а) дает подсистемы LiF-LiCl-NaCl- UCl_3 ($x_1x_4x_5x_6$) (б), LiF-NaF-NaCl-R1 ($x_1x_2x_5x_7$) (в), LiF-NaCl-R1-R2 ($x_1x_5x_7x_8$) (г), LiF- UF_4 -NaCl-R2 ($x_1x_3x_5x_8$) (д), LiF- UF_4 -NaCl- UCl_3 ($x_1x_3x_5x_6$) (е)

В пятой главе описана технология прототипирования, которая демонстрируется на T-x-y диаграммах двух типов: эвтектической и с двойным инконгруэнтно плавящимся соединением. Совместное использование графического пакета AutoCAD и табличного процессора Excel позволяет после проведения необходимых расчетов, производимых в Excel, переходить к построению в AutoCAD трехмерных объектов – фазовых областей T-x-y диаграммы и далее - сборке из них фазовых диаграмм. С этой целью формируется ТЗ - техническое задание для прототипирования разборных T-x-y диаграмм.

Выводы и основные результаты

1. Для расшифровки/кодирования геометрического строения T-x-y-z диаграмм разработаны табличные и четырехмерные схемы ди-, моно- и неинвариантных состояний. Проведенная с их помощью формализация геометрического строения фазовых диаграмм позволяет идентифицировать их топологический

тип и по набору экспериментальных данных выполнять прогноз фазовых превращений.

2. Построены 3D компьютерные модели T-x-y диаграмм тройных систем, формирующих четверные системы $\text{LiF-NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$ и $\text{UCl}_3\text{-NaCl-MgCl}_2\text{-PuCl}_3$ системы. Для каждой системы проведен литературный анализ и составлен подробный отчет с описанием геометрического строения (поверхностей и фазовых областей), расчетами изо- и политермических разрезов, разбиением на концентрационные поля, прогнозом микроструктурных составляющих, расчетом путей кристаллизации и диаграмм материального баланса для выбранных центров масс, моделированием ДТА-спектров. В Приложениях 3-5 эти возможности демонстрируются на примере тройной системы $\text{NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$. Качество моделей подтверждается сравнением модельных сечений с экспериментальными.

3. На основании данных по тройным системам выполнен прогноз геометрического строения T-x-y-z диаграмм $\text{LiF-NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$ и $\text{UCl}_3\text{-NaCl-MgCl}_2\text{-PuCl}_3$ и построены 4D компьютерные модели, хорошо воспроизводящие эксперимент, что говорит об их адекватности. При этом временное отсутствие некоторых важных данных (например, определение температур невариантных реакций требует дополнительных экспериментов) не является препятствием для построения промежуточного варианта (прототипа) модели фазовой диаграммы.

4. Дан прогноз геометрического строения T-x-y-z диаграмм подсистем LiF-NaF-NaCl-R1 , $\text{LiF-UF}_4\text{-NaCl-UCl}_3$, $\text{LiF-UF}_4\text{-NaCl-R2}$, $\text{LiF-LiCl-NaCl-UCl}_3$, LiF-NaCl-R1-R2 , $\text{LiF-UCl}_3\text{-R1-R2}$, $\text{LiF-NaF-NaCl-UCl}_3$, $\text{LiF-NaF-UCl}_3\text{-R1}$, $\text{LiF-UF}_4\text{-UCl}_3\text{-R2}$, $\text{LiF-UF}_4\text{-LiCl-NaCl}$, $\text{UF}_4\text{-LiCl-NaCl-UCl}_3$, где R1 и R2 – конгруэнтно плавящиеся соединения $3\text{NaF}\cdot\text{UF}_4$ и $7\text{NaF}\cdot 6\text{UF}_4$, полученных при полиэдризации взаимной системы Li,Na,U||F,Cl .

5. Для прототипирования фазовых диаграмм и их фрагментов разработана технология построения 3D моделей T-x-y диаграмм на основе совместного использования графического пакета AutoCAD и табличного процессора Excel.

Список цитируемой литературы

1. Beilmann, M. Thermodynamic Investigation of the $(\text{LiF}+\text{NaF}+\text{CaF}_2+\text{LaF}_3)$ System / M. Beilmann, O. Beneš, R.J.M. Konings, Th. Fanghänel // J. Chem. Thermodynamics. - 2011. - Vol. 43. - P. 1515-1524; doi:10.1016/j.jct.2011.05.002.

2. Stasjuk, V.A. Liquidus and Solidus of Fluorite Solid Solutions in the $\text{CaF}_2\text{-SrF}_2\text{-LaF}_3$ System / V.A. Stasjuk, I.I. Buchinskaya, N.A. Ust'yanceva, P.P. Fedorov, V.V. Arbenina // Russ. J. Inorgan. Chem. - 1998. - Vol. 43. - No 8. - P. 1266-1269.

3. Pelton, A.D. Thermodynamic Evaluation and Optimization of the $\text{LiCl-NaCl-KCl-RbCl-CsCl-MgCl}_2\text{-CaCl}_2$ System Using the Modified Quasi-Chemical Model / A.D. Pelton, P. Chartrand // Metallurgical and Materials Transactions A. - 2001. - Vol. 32A. - P. 1361-1383; doi: <https://doi.org/10.1007/s11661-001-0227-2>.

Основное содержание диссертации изложено в следующих работах:
– статьи в периодических изданиях, индексируемых в Scopus, Web of Sci-

ence, РИНЦ:

1. Lutsyk V.I. Polyhedration of Multicomponent Mineral Systems / V.I.Lutsyk, V.P.Vorob'eva, O.G.Sumkina, **M.V. Lamueva** // IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline).- 2013. – 15 (PART 1). - P. 288-293 (**Scopus**).

2. Lutsyk V.I. Calculation of Phase Trajectories for Microstructural Analysis in Liquidus Fields of Cristobalite and Tridymite for System FeO-SiO₂-Fe₂O₃ / V.I.Lutsyk, A.E.Zelenaya, **M.V.Lamueva** //Journal of Physics: Conference Series. - 2020. - V. 1441, 012011; doi:10.1088/1742-6596/1441/1/012011 (**Scopus**).

3. Vorob'eva V.P. 3D Computer Models of the T-x-y Diagrams, Forming the LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ T-x-y-z Diagram / V.P.Vorob'eva, A.E.Zelenaya, V.I.Lutsyk, **M.V.Lamueva** //Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. - 2020. - V. 11. - No 3. - P. 345-354; doi: 10.17586/2220-8054-2020-11-3-345-354 (**Web of Science, Scopus**).

4. Vorob'eva V. T-x-y-z Diagram Prediction for the Quaternary System Li,Na,Ca,La||F / V.Vorob'eva, A.Zelenaya, V.Lutsyk, **M.Lamueva** //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. - 2020. - V. 1000, 012007; doi:10.1088/1757-899X/1000/1/012007 (**Scopus**).

5. Lutsyk V.I. T-x-y 3D Computer Model of the Co-Cu-CoS-Cu₂S Subsystem T-x-y Diagram Above 800°C / V.I.Lutsyk, V.P.Vorob'eva, A.E.Zelenaya, **M.V.Lamueva** //Journal of Mining and Metallurgy. Section B: Metallurgy. - 2021; <https://doi.org/10.2298/JMMB190307028L> (**Web of Science, Scopus**)(в печати).

6. Воробьева В.П. 3D компьютерная модель Т-х-у диаграммы CaO-MgO-Al₂O₃ при температурах выше 1300°C / В.П.Воробьева, А.Э.Зеленая, В.И.Луцкык, **М.В.Ламуева** //Конденсированные среды и межфазные границы. - 2021. - Т. 23. - № 3. - С. 380-386; <https://doi.org/10.17308/kcvf.2021.23/00> (**Web of Science, Scopus, РИНЦ**).

– публикации в других изданиях:

1. Osokina A.H. Liquid Immiscibility Gap Technology within the Ternary Systems / A.H.Osokina, V.I.Lutsyk, A.E.Zelenaya, **M.V.Lamueva** //Сб. науч. трудов II Всерос. научно-технич. конф. молодых ученых, аспирантов и студентов с межд. участием "Высокие технологии в современной науке и технике". - Томск: изд-во нац. исследоват. Томского политехнич. ун-та. - 2013. - С. 418-422 (**РИНЦ**).

2. **Ламуева М.В.** (Excel+Acad) – технология исследования Т-х-у-z диаграмм / М.В.Ламуева, Б.В.Мохосоев, М.Д.Парфенова, Е.Р.Урмакшинова //Сб. трудов X межд. Курнаковского совещ. по физ.-хим. анализу. – Самара. - 2013. - Т. 1. - С. 130-135.

3. **Ламуева М.В.** Объектно-ориентированное конструирование многокомпонентных систем / М.В.Ламуева, И.Г.Григорьев, А.Э.Зеленая, В.В.Савинов // Сб. трудов X межд. Курнаковского совещ. по физ.-хим. анализу. – Самара. - 2013. -Т. 1. - С. 136-140.

4. Луцкык В.И. Роль кристаллизационных схем в расшифровке генотипа гетерогенного материала / В.И.Луцкык, **М.В.Ламуева**, М.Д.Парфенова, О.Г.Сумкина // Сб. трудов X межд. Курнаковского совещ. по физ.-хим. анализу. – Самара. - 2013. - Т. 2. С. 241-246.

5. **Lamueva M.V.** Li,Na,K,Rb,Cs,La,Pu||F and Na,Mg,Pt,U||Cl Systems for Generation IV Nuclear Technology: 3D Models of T-x-y Diagrams / **M.V.Lamueva**, V.I.Lutsyk, A.E.Zelenaya, E.N.Malygina, S.N.Mogloeva //Abstracts of the XIX Intern. Conf. on Chemical Thermodynamics in Russia. - Moscow. - 2013. - P. 423.

6. Lutsyk V. System Li,Na,K,Rb,Cs,La,Pu||F for the Generation IV Nuclear Technology: T-x-y Diagrams / V.Lutsyk, A.Zelenaya, **M.Lamueva** //Abstracts of the I Intern. Conf. on Rheology and Modeling of Materials. - Miscolc, Hungary. -2013. - P. 124.

7. Луцык В.И. Модели тройных систем с расслоением расплава для синтеза интерметаллидов по новой технологии / В.И.Луцык, **М.В.Ламуева**, А.Э.Зеленая //Тез. докл. IV межд. научно-техн. конф. "Персп. технологии, материалы и оборудование в литейном производстве". - Краматорск, Украина. - 2013. - С. 133-134.

8. **Ламуева М.В.** Определение смены типа трехфазного превращения с помощью трехмерных компьютерных моделей Т-х-у диаграмм / М.В.Ламуева //Сб. мат. X Рос. ежегодной конф. молодых научных сотрудников и аспирантов "Физико-химия и технология неорганических материалов". – Москва. - 2013. - С. 100-102.

9. **Ламуева М.В.** (Exel+Acad) – технология исследования Т-х-у-з диаграмм / М.В.Ламуева //Сб. мат. Всерос. молодежн. науч. конф. с межд. участием "Инновации в материаловедении". – Москва. - 2013. - С.184.

10. **Ламуева М.В.** Система Li,Na,K,Rb,Cs,La, Pu||F для реакторов 4-го поколения: Т-х-у диаграммы / М.В.Ламуева, А.Э.Зеленая, С.Н.Моглоева //Сб. докл. X конф. по фундамент. и прикл. проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов). - Улан-Удэ. - 2013. - С. 12-15.

11. Парфенова М.Д. 3D модели А,В,La||F систем (А и В - Li, Na, K) для реактора 4-го поколения / М.Д.Парфенова, В.И.Луцык, А.Э.Зеленая, **М.В.Ламуева** //Материалы I Всерос. научной конф. молодых ученых с межд. участием "Перспективные материалы в технике и строительстве (ПМТС-2013)". - Томск: изд-во Томского гос. архитектурно-строит. ун-та. - 2013. - С. 271-273 (**РИНЦ**).

12. Osokina A.H. Liquid Immiscibility Gap Technology within the Ternary Systems / А.Н.Осокина, V.I.Lutsyk, А.Е.Зеленая, **M.V.Lamueva** //Тез. докл. II Всерос. совещания зав. кафедрами неорг. химии и I Всерос. конф. молодых ученых "Современная неорганическая химия в ВУЗах России". - Москва, МГУ имени М.В.Ломоносова. - 2013. - С. 94-97.

13. Кучанский П.В. Полиэдрация взаимной системы Na,K,Ba||WO₄,F с конкуренцией внутренних диагоналей / П.В.Кучанский, В.И.Луцык, В.П.Воробьева, М.Д.Парфенова, **М.В.Ламуева** //Сб. докл. XII конф. по фундамент. и прикл. проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов). - Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН. - 2015. - С. 51-54.

14. Парфенова М.Д. Расшифровка путей кристаллизации в керамической системе FeO-SiO₂-Fe₂O₃ / М.Д.Парфенова, **М.В.Ламуева**, В.И.Луцык, А.Э.Зеленая //Сб. мат. III междисциплинар. молодежн. науч. форума с межд. участием "Новые материалы". - Москва: ООО «Буки Веди». - 2017. - С. 429-431

(РИНЦ).

15. Луцык В.И. Сборка Т-х-у диаграмм по схемам фазовых реакций и имитация их экспериментального исследования / В.И.Луцык, **М.В.Ламуева**, М.Д.Парфенова //Мат. Всерос. науч. конф. с межд. участием "III Байкальский материаловедческий форум". Ч. 2. - Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН. - 2018. - С. 192-193.

16. **Ламуева М.В.** (Excel+Acad)-Technology of Construction of Isothermal Sections of T-x-y-z Phase Diagrams of Quaternary Systems / М.В.Ламуева, В.И.Луцык, М.Д.Парфенова //Материалы V науч. конф. с межд. участием "Геометрия многообразия и ее приложения", посв. 100-летию профессора Р. Н. Щербакова. - Улан-Удэ: Изд-во Бурятского госун-та. - 2018. - С. 147-153 **(РИНЦ).**

17. **Ламуева М.В.** Polyhydration of Concentration Complexes of Multicomponent Systems with Exchange Interaction / М.В.Ламуева, В.П.Воробьева, В.И.Луцык, М.Д.Парфенова // Материалы V науч. конф. с межд. участием "Геометрия многообразия и ее приложения", посв. 100-летию профессора Р. Н. Щербакова. - Улан-Удэ: Изд-во Бурятского госун-та. - 2018. С. 154-163 **(РИНЦ).**

18. Парфенова М.Д. Прототипирование фазовых областей разборных моделей Т-х-у диаграмм и концентрационных комплексов четверных взаимных систем / М.Д.Парфенова, **М.В.Ламуева**, В.П.Воробьева, В.И.Луцык //Тез. докл. XVII Всерос. молодежн. науч. конф. с элементами науч. школы – "Функциональные материалы: синтез, свойства, применение", посв. 110-летию со дня рождения член.-корр. АН СССР Н. А. Торопова. - Санкт-Петербург: ООО Изд-во "ЛЕМА". - 2018. - С. 84-85 **(РИНЦ).**

19. **Ламуева М.В.** Пути кристаллизации в системах FeO-SiO₂-Fe₂O₃ и Mg₂SiO₄-CaAl₂Si₂O₈-SiO₂ / М.В.Ламуева, М.Д.Парфенова, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Там же. С. 118 **(РИНЦ).**

20. **Ламуева М.В.** Сборка Т-х-у диаграмм и дизайн микроструктур в тройных системах на ограничении системы LiF-BeF₂-ZrF₄-UF₄ для расплавленно-солевого ядерного реактора / М.В.Ламуева, М.Д.Парфенова, А.Э.Зеленая, В.И. Луцык В.И. //Там же. С. 201 **(РИНЦ).**

21. Парфенова М.Д. Компьютерные модели Т-х-у диаграмм на ограничении четверной системы CaO-MgO-Al₂O₃-SiO₂ / М.Д.Парфенова, **М.В.Ламуева**, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Там же. С. 228-229 **(РИНЦ).**

22. Парфенова М.Д. Сборка Т-х-у диаграммы FeO-SiO₂-Fe₂O₃ для расчета материальных балансов и отображения путей кристаллизации / М.Д.Парфенова, **М.В.Ламуева**, В.И.Луцык, А.Э.Зеленая //XXIV Всерос. науч. конф. студентов-физиков и молодых ученых (ВНКСФ-24, Томск): мат. конф., тез. докл. - Екатеринбург-Томск: изд-во АСФ России. - 2018. - С. 511-512.

23. Lutsyk V. Materials for the Nuclear Reactors of Generation IV: Polyhydration of the Chloride-Fluoride Reciprocal Systems / V.Lutsyk, V.Vorob'eva, M.Parfenova, **M.Lamueva** //Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition SIPS-2018. Intl. Symp. on Sustainable Molten Salt and Ionic Liquid Processing. - Id Paper: 96.

24. Ламуева М.В. 3D модель Т-х-у диаграммы системы LiF-NaF-RbF / М.В.Ламуева, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Сб. докладов молодых ученых, аспирантов и студентов на XV конференции по фундаментальным и прикладным проблемам физики. - Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН. - 2018. - С. 3-5.

25. Парфенова М.Д. Матбалансы и траектории фаз в концентрационных полях Т-х-у диаграммы FeO-SiO₂-Fe₂O₃ / М.Д.Парфенова, М.В.Ламуева, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Сб. мат. научных чтений им. И.А. Одингга "Механические свойства современных конструкционных материалов". - М: ИМЕТ РАН, 2018. С. 109-110.

26. Lutsyk V. Variants of T-x-y-z Diagrams for Subsystems LiF-LiCl-NaCl-UCl₃, LiF-NaF-NaCl-UCl₃, 7NaF·6UF₄-LiF-UF₄-UCl₃, 3NaF·UF₄-LiF-NaF-UCl₃ / V.Lutsyk, V.Vorob'eva, M.Parfenova, М.Ламуева //Sustainable Industrial Processing Summit & Exhibition SIPS-2019. Intl. Symp. on Sustainable Molten Salt and Ionic Liquid Processing. - 2019. - Id Paper: sips19_13_125.

27. Lutsyk V. Forecast of Geometrical Structure for T-x-y-z Diagram Li,Na,Th,U||F / V.Lutsyk, A.Zelenaya, M.Parfenova, М.Ламуева //Ibid. Id Paper: sips19_13_173.

28. Ершова Ю.С. Прототипирование фазовых областей для сборки 3D-пазлов Т-х-у диаграмм трехкомпонентных систем с четырехфазными нонвариантными превращениями. Разработка технических заданий / Ю.С.Ершова, М.Д.Парфенова, М.В.Ламуева, В.И.Луцык //Прикл. исследования в области физики. Сб. трудов всерос. научно-практич. конф. - Иркутск: ИНИТУ. - 2019. - 72-76 с. (РИНЦ).

29. Парфенова М.Д. Имитации экспериментального исследования тройных систем компьютерными моделями Т-х-у диаграмм / М.Д.Парфенова, М.В.Ламуева //Актуальные проблемы современной науки: мат. VIII регион. науч.-практ. конф. с межд. участием. - Омск: Изд-во ОмГТУ. - 2019. - С. 99-104 (РИНЦ).

30. Ламуева М.В. Топологические варианты строения Т-х-у диаграммы системы LiF-KF-RbF / М.В.Ламуева, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Сб. докл. XVI конф. по фунда. и прикл. проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов). - Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН, - 2019. - С. 16-18.

31. Парфенова М.Д. АКАД+ЭКСЕЛЬ разрезы Т-х-у диаграмм Р.Г. Коннелла / М.Д.Парфенова, М.В.Ламуева, Б.В.Цынгеев, В.И.Луцык //Сб. докл. XVI конф. по фунда. и прикл. проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов). - Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН. - 2019. - С. 22-23.

32. Ламуева М.В. Тройные и четверные галогенидные системы для ядерного реактора 4-го поколения / М.В.Ламуева, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Сб. статей национальной научно-практич. конф. "Образование и наука". Отв. редактор Л.А. Бохоева. - 2020. - С. 137-146; doi: 10.18101/978-5-9793-1496-9-137-146 (РИНЦ).

33. Lamueva M. Computer Model of T-x-y Diagram FeO-Fe₂O₃-SiO₂ / М.Ламуева, А.Зеленая, V Lutsyk //Материалы с заданными свойствами на переходе к новому технологич. укладу: химические технологии: сб. мат. II науч-

но-технич. конф. - Москва: НИЦ "Курчатовский институт" (29 октября 2020). - 2020. - С. 184-185.

34. **Ламуева М.В.** Коррекция графики Т-Х-У диаграмм в системах с бесвинцовыми припоями / М.В.Ламуева, В.П.Воробьева, В.И.Луцык //Экологобезопасные и ресурсосберегающие технологии и материалы: мат. IV Всерос. молодежн. науч. конф. с межд. участием. В 2 ч. - Улан-Удэ. - 23-26 сентября 2020. - Ч 1. - С. 109-110.

35. **Ламуева М.В.** Компьютерная модель Т-х-у диаграммы системы LiF-NaF-CaF₂ и анализ концентрационных полей на ее основе / **М.В.Ламуева**, М.Д.Парфенова, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык.//Экологобезопасные и ресурсосберегающие технологии и материалы: мат. IV Всерос. молодежн. науч. конф. с межд. участием. В 2 ч. - Улан-Удэ. - 23-26 сентября 2020. - Ч 1. - С. 107-108.

36. **Ламуева М.В.** Компьютерная модель фазовой диаграммы системы LiF-PuF₃-KF / М.В.Ламуева, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //VI междисципли. науч. форум с межд. участием "Новые материалы и перспективные технологии". - Москва. - 2020. - Сб. мат. Т. 2. - С. 128- 133 (**РИИЦ**).

37. **Ламуева М.В.** Компьютерная модель Т-х-у диаграммы LiF-NaF-LaF₃ и анализ концентрационных полей на ее основе / М.В.Ламуева, М.Д.Парфенова, А.Э.Зеленая, В.И.Луцык //Сб. докл. XVII конф. по фундамент. и прикл. проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов). - Улан-Удэ: изд-во БНЦ СО РАН. - 2020. - С. 3-6.

38. **Ламуева М.В.** Варианты вывода уравнения гиперболического параболоида и его вырождения для моделирования фазовых диаграмм / М.В.Ламуева, В.П.Воробьева, В.И.Луцык //Сб. докл. XVII конф. по фундамент. и прикл. проблемам физики (молодых ученых, аспирантов и студентов). - Улан-Удэ: изд-во БНЦ СО РАН. - 2020. - С. 7-13.

39. **Ламуева М.В.** Участие кривинанты гиперболического параболоида в конструировании поверхностей фазовых диаграмм / М.В.Ламуева, В.П.Воробьева, В.И. Луцык //Мат. VI науч. конф. с межд. участием "Геометрия многообразий и ее приложения". - Улан-Удэ: Изд-во Бурятского гос. ун-та. - 2020. - С. 124-133.

41. Lutsyk V. Computer 3D & 4D models of T-x-y & T-x-y-z diagrams of the Ternary & Quaternary Systems as a Novel Tool in Chemistry & Materials Science / V.Lutsyk, V.Vorob'eva, A.Zelenaya, **M.Lamueva**, M.Parfenova //“Chemistry Virtual 2020”.Webinar: Book of Abstracts. - Sept 21-22, 2020. - P. 18.

41. Parfenova M. T-x-y Diagrams Verification after Thermodynamic Calculation: Ag-Cu-Ni / M.Parfenova, V Vorobjeva., **M.Lamueva** //CALPHAD GLOBAL conference. - June 2021, <https://calphad.org/registration-payment-abstract/posters-in-category-experimental-phase-equilibria-thermodynamics-and-kinetics>.

42. Парфенова М.Д. Разработка технических заданий для прототипирования разборных Т-х-у диаграмм (Excel+Autocad технология): учебно-метод. пособие. / М.Д.Парфенова, **М.В.Ламуева**, В.И.Луцык / - Улан-Удэ: изд-во Бурятского госуниверситета, - 2021. - 58 с. - ISBN 978-5-9793-1615-4.