

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Ламуевой Марины Владимировны «Верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм и полиэдризация концентрационных комплексов в задачах разработки материалов расплавно-солевого реактора 4-го поколения», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Актуальность темы.

Целью рецензируемой работы является разработка методологии исследования многокомпонентных фторидных и хлоридных систем, а также фторид-хлоридных взаимных систем для подбора оптимальных составов, удовлетворяющих требованиям концепции жидко-солевого ядерного реактора 4-го поколения. Автор развивает метод, который позволяет строить полные фазовые диаграммы многокомпонентных фторид-хлоридных систем и прогнозировать изменение физико-химических свойств этих систем по мере накопления продуктов ядерных превращений. Это необходимо для целей разработки указанных реакторов и обеспечения их безопасной эксплуатации в будущем.

Таким образом, **актуальность** представленной работы определяется созданием метода компьютерного моделирования фазовых диаграмм для систем, работающих в расплавно-солевых ядерных реакторах 4-го поколения. Важность проведенной работы не вызывает сомнений как с точки зрения совершенствования методов компьютерного моделирования и анализа фазовых диаграмм сложных систем, так и с точки зрения практического применения полученных автором результатов.

Структура и основное содержание работы.

Содержание диссертации соответствует формуле паспорта специальности 1.3.8 «физика конденсированного состояния». Она состоит из введения, пяти глав, обсуждения и выводов, списка литературы, включающего 127 наименований, пяти приложений. Диссертация содержит 125 страниц, 58 рисунков, 23 таблицы.

Во введении сформулированы цели и задачи выполненного исследования, обоснована его актуальность, новизна и практическая значимость, изложено 4 защищаемых положения.

В первой главе сделан квалифицированный обзор литературы. Показано, что в научной литературе приводится информация о строении фазовых диаграмм фторидных, хлоридных и фторид-хлоридных систем, ограниченная только визуализацией поверхности ликвидуса и некоторого количества термических разрезов. Из чего становится ясно, что полная модель диаграммы, включающая не только фазовые области с участием расплава, но и твердофазные области, была бы весьма полезна. Проведен экскурс в алгоритмы, используемые для триангуляции фазовых диаграмм. Описан алгоритм построения фазовых диаграмм тройных и четверных систем.

После прочтения первой главы становится очевидным, что автор диссертации хорошо разобрался в современном состоянии проблемы, понимает существующие методы исследования, знает их достоинства и недостатки, а также понимает, в чем их можно усовершенствовать. В качестве небольшого недостатка можно отметить только кажущуюся излишней краткость

литературного обзора - на данную главу приходится менее 10 % от всего текста диссертации, что подразумевает наличие у читающего некоторых предварительных знаний по теме. Тем не менее, из текста видно, что автор хорошо проработал имеющуюся в литературе информацию.

Вторая глава посвящена построению 3D моделей T-x-y фазовых диаграмм тройных систем, образующих четырехкомпонентную систему фторидов лития, натрия, кальция и лантана: LiF-NaF-CaF_2 , LiF-NaF-LaF_3 , $\text{LiF-CaF}_2\text{-LaF}_3$, $\text{NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$. Для каждой системы произведено описание геометрического строения фазовой диаграммы, рассчитаны изо- и политермические разрезы, сделан прогноз микроструктуры, рассчитаны пути кристаллизации и диаграммы материального баланса для выбранных центров масс. Качество моделей подтверждается сравнением модельных сечений с экспериментальными. Произведен прогноз геометрического строения 4D T-x-y-z диаграммы системы $\text{LiF-NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$.

Третья глава посвящена построению 4D модели T-x-y-z диаграммы хлоридной системы $\text{UCl}_3\text{-NaCl-MgCl}_2\text{-PuCl}_3$. Для подсистемы $\text{UCl}_3\text{-NaCl-PuCl}_3$ проведено сопоставление изотермического разреза при $T=873$ К с разрезом, доступным в литературе. Очевидное согласие в этом частном аспекте говорит об общей аккуратности модели. В целом показано, что построенные 3D и 4D модели способны воспроизводить опубликованные 2D сечения и представлять любые изо- и политермические сечения.

В четвертой главе представлены результаты полиэдрации взаимной фторид-хлоридной системы Li,Na,U||F,Cl . В условиях недостатка экспериментальных данных показано, что полиэдрация системы Li,Na,U||F,Cl с соединениями $3\text{NaF} \cdot \text{UF}_4$ и $7\text{NaF} \cdot 6\text{UF}_4$ возможна в трех вариантах, в каждом варианте можно выделить пять четверных подсистем. Для 11 уникальных в данных разложениях четверных подсистем приведен предполагаемый топологический тип ликвидуса.

В пятой главе пошагово описан алгоритм создания 3D-печатных моделей T-x-y фазовых диаграмм. Благодаря этому можно создавать наглядные прототипы T-x-y фазовых диаграмм и их фрагментов.

Достоверность и обоснованность выводов, полученных в работе, обеспечивается использованием современных численных методик, согласием результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными. Работа была широко апробирована при публикации статей и выступлениях на конференциях.

Ценность работы заключается не только в построении моделей фазовых диаграмм для конкретных систем, перспективных в качестве топлива для ядерных реакторов IV поколения, но и в самом развитии методов моделирования фазовых диаграмм сложных систем. Развиваемый автором инструмент может оказаться полезен для широкого круга физических задач.

Замечания по тексту диссертации:

1. Глава, посвященная обзору литературы, выглядит сжато. Вероятно, в ней бы нашлось место для того, чтобы напомнить читателю базовую часть. Что такое эвтектика, перитектика, метатектика, вариантность состояния? Что такое T-x, T-x-y, T-x-y-z диаграммы?

2. На странице 15 дано описание распространенного метода триангуляции: “В этом методе полиэдр с триангулированными гранями представлен как неориентированный граф [73-79]. После нумерации вершин полиэдра и точек, соответствующих соединениям (на ребрах, гранях и внутри полиэдра), составляется матрица смежности. Перемножение ее нулевых элементов с учетом закона поглощения и последующая инверсия формируют список симплексов, на которые разбивается полиэдр”.

Далее говорится, что “... была разработана программа полиэдрации многокомпонентных систем, основанная на представлении n -компонентной системы в виде графа, его описании матрицей смежности, перемножении нулевых элементов списка смежности с учетом закона поглощения и инверсии”.

Из сказанного не вполне очевидно, чем новый метод отличается от уже существующего.

Редакционные замечания:

1. Смешение различных шкал для обозначения температуры (стр. 31).

2. На странице 32, в конце первого абзаца, по всей видимости, вместо “Т-х-у” имеется в виду “Т-х-у- z ” диаграмма системы, т.е. диаграмма четверной системы, поскольку из контекста складывается впечатление, что речь идет о модели диаграммы четверной системы.

Указанные замечания не умаляют ценности основного содержания диссертации.

Заключение.

Диссертационная работа Ламуевой Марины Владимировны выполнена на высоком научном уровне и представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для физики конденсированных сред и физического материаловедения.

Автореферат диссертации и опубликованные работы автора отражают научную новизну и содержание работы.

Считаю, что диссертационная работа Ламуевой Марины Владимировны «Верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм и полиэдрация концентрационных комплексов в задачах разработки материалов расплавно-солевого реактора 4-го поколения» по своей актуальности, научному уровню, объёму решаемых задач и завершённости исследования отвечает всем критериям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Ламуева Марина Владимировна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 “физика конденсированного состояния”.

Официальный оппонент,
Богданов Александр Иванович
старший научный сотрудник
Института геохимии им. А.П. Виноградова
Сибирского отделения Российской академии наук,
к.ф.-м.н. (01.04.07 - физика конденсированного состояния)

Богд

А.И. Богданов
8 декабря 2021 г.

Почтовый адрес:
664033, г. Иркутск, Фаворского 1А.
Тел.: 8 (3952) 426600
e-mail: alex.bogdanov2012@gmail.com



Подпись А.И. Богданова заверяю
Ученый секретарь ИГХ СО РАН, к.ф.-м.н.

И.Ю. Пархоменко