

«УТВЕРЖДАЮ»

Научный руководитель  
ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова»,  
Председатель НТС  
д-р техн. наук, проф.

В. А. Василенко

«03» декабря 2021 г.

## О Т З Ы В

ведущей организации – Федерального государственного унитарного предприятия  
«Научно-исследовательского технологического института имени А.П. Александрова» –  
на диссертационную работу

**Ламуевой Марины Владимировны**

**«Верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм**

**и полиэдрация 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  
в диссертационный совет Д 24.2.306.01 при Иркутском государственном университете

### **1 Актуальность диссертационной работы**

Диссертационная работа М. В. Ламуевой посвящена теме поиска путей представления и верификации данных о фазовых равновесиях в тройных и четверных системах, образуемых фторидами и хлоридами урана, плутония, лантана, щелочных и щелочноземельных металлов. Актуальность работы не вызывает сомнения по причине того, что объекты исследования являются перспективной основой топливных композиций одного из интереснейших вариантов ядерных реакторов IV поколения – реакторных установок на расплавах солей. В более широком смысле, предложенные автором подходы и математический аппарат позволяют провести детальный анализ фазовых равновесий в трех и четырехкомпонентных системах с указанием неопределенностей в имеющихся экспериментальных данных и результатах термодинамических расчетов фазовых диаграмм, что, несомненно, является актуальной задачей не только в атомной энергетике, но и во многих других областях знаний: химии, физике, геологии, материаловедении, машиностроении.

### **2 Цель и задачи диссертационной работы**

Цель диссертационной работы М. В. Ламуевой состояла в разработке методологии исследования многокомпонентных фторидных, хлоридных и взаимных систем для

реализации возможности эффективного поиска оптимальных составов, удовлетворяющих требованиям концепции ядерных реакторов IV поколения на расплавах солей.

Для достижения этой цели решались следующие задачи:

- построение пространственных компьютерных моделей  $T$ - $x$ - $y$  и  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграмм фторидных, хлоридных и фторид-хлоридных систем, образующихся при полиэдризации 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;

- разработка методики построения схем ди-, моно- и невариантных состояний для вывода и описания геометрического строения  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграмм четырехкомпонентных систем.

Диссертационная работа представляет собой законченное научно-квалификационное исследование, направленное на эффективное решение перечисленных выше научных задач для достижения поставленной цели.

### **3 Научная новизна результатов диссертационной работы**

Работа обладает конкретными признаками научной новизны, которая выражается в том, что:

- проведено обоснование использования разработанных автором пространственных компьютерных моделей  $T$ - $x$ - $y$  и  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграмм фторидных, хлоридных и смешанных систем для проверки достоверности результатов термодинамических расчетов и построенных по экспериментальным данным их изотермических и политермических разрезов;

- с использованием авторского подхода к формализации геометрического строения  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграмм в виде схем ди-, моно- и невариантных состояний, выполнен прогноз топологических типов фазовых диаграмм и возможных фазовых превращений в четверных системах при минимуме экспериментальных данных.

### **4 Практическая значимость результатов диссертационной работы**

Практическая значимость выполненной работы заключается в следующем:

- выполнено геометрическое построение 3D моделей  $T$ - $x$ - $y$  диаграмм фторидных и хлоридных систем различной сложности. В некоторых из них более 70 построенных поверхностей и более 25 описанных фазовых областей;

- с применением широко распространенных программных продуктов – Microsoft Excel и Autodesk AutoCAD, разработана авторская технология подготовки информации для

прототипирования разборных фазовых диаграмм тройных систем, что позволило более эффективно и корректно проводить верификацию результатов экспериментальных данных и термодинамических расчетов фазовых диаграмм;

- впервые построены компьютерные 4D  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграммы четверных систем  $UCl_3$ - $NaCl$ - $MgCl_2$ - $PuCl_3$  и  $LiF$ - $NaF$ - $CaF_2$ - $LaF_3$ , перспективных в качестве топливных композиций и имитаторов топливных композиций жидкосолевых реакторов IV поколения. Модели имеют колоссальную сложность. Хлоридная система состоит из 66 гиперповерхностей и 30 фазовых областей, а фторидная – из 169 гиперповерхностей и 62 фазовых областей. Трудно себе представить возможность геометрического описания этих систем традиционными способами, такими как экспериментальное построение двойных и тройных изотермических и политермических разрезов, проекций поверхности ликвидуса и других графических и математических способов представления данных о фазовых равновесиях. Даже с использованием распространенных программных комплексов, позволяющих проводить термодинамический расчет фазовых равновесий и строить необходимые разрезы, таких как Thermo-calc и FactSage, это – чрезвычайно трудоемкая на данном этапе развития этих программных средств задача;

- впервые проведена тетраэдрация четверной взаимной системы  $Li, Na, U || F, Cl$  с конгруэнтно плавящимися соединениями  $Na_3UF_7$  и  $Na_7U_6F_{11}$ . Дано описание 11 итоговых четверных систем.

## **5 Оценка содержания и завершенности диссертационной работы**

Диссертация состоит из введения, литературного обзора (глава 1); описания сборки из (гипер)поверхностей и фазовых областей для построения 3D и 4D компьютерных моделей фазовых диаграмм состояния четырехкомпонентных фторидной ( $LiF$ - $NaF$ - $CaF_2$ - $LaF_3$ , глава 2) и хлоридной ( $UCl_3$ - $NaCl$ - $MgCl_2$ - $PuCl_3$ , глава 3) систем, а также восьми их образующих трехкомпонентных систем; результатов полиэдрации четверной фторид-хлоридной взаимной системы  $Li, Na, U || F, Cl$  на пять четверных систем в трех разных вариантах в зависимости от стабильности диагоналей ограняющих взаимных систем (глава 4); представления технологии на основе Excel и AutoCAD для разработки технических заданий прототипирования разборных  $T$ - $x$ - $y$  диаграмм (глава 5); обсуждения результатов, выводов, списка цитируемой литературы (126 ссылок) и Приложения, которое содержит копию акта внедрения результатов диссертационной работы. Общий объем диссертации – 125 страниц с приложениями (101 страница основного текста), включающих 58 рисунков и 23 таблицы. Текст диссертации изложен на хорошем научно-техническом и литературном уровне. Следует особо подчеркнуть, что диссертационная работа прекрасно иллюстрирована.

*Во введении* приведены основные характеристики работы: актуальность выбранной темы, степень ее проработанности на момент начала диссертационного исследования. Исходя из актуальности и степени проработанности темы, сформулирована цель работы, определены ее научная новизна и практическая значимость, дано краткое перечисление методов исследования, выносимые на защиту положения, апробация и личный вклад автора работы.

*Первая глава* посвящена обзору литературы. Анализ представленного материала позволил автору обосновать выбор темы работы, объектов исследования, сформулировать цель исследования, а также выработать стратегию и тактику действий, направленных на ее достижение.

*Во второй главе* дается подробное описание построения 3D компьютерных моделей  $T$ - $x$ - $y$  диаграмм фторидных систем Li, Na, Ca и La, включая этапы формирования схемы моно- и невариантных состояний в табличной форме (в виде схем фазовых реакций Эриха Шейла) и в графической форме. Используя полученную таким образом форму в качестве каркаса, формируется прототип фазовой диаграммы. На последнем этапе подготовленный прототип подвергается уточняющим действиям: вводу реальных координат (составов и температур) характеристических точек фазовых диаграмм, по которым строится  $T$ - $x$ - $y$  диаграмма, и коррекции кривизны невариантных линий и поверхностей.

В этой главе демонстрируются также возможности каждой полученной 3D модели строить любые изо- и политермические разрезы, выводить пути кристаллизации произвольно выбранного состава, визуализировать результаты расчетов материальных балансов с помощью диаграмм, специально созданных для решения этой задачи.

На базе построенных моделей выполнен прогноз, предсказывающий геометрическое строение формируемых тройными системами  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграммы четверной фторидной системы. Производит впечатление сложность полученной модели фазовой диаграммы, по утверждению автора состоящей из 169 гиперповерхностей и 62 фазовых областей, что весьма наглядно иллюстрирует эффективность разработанного автором подхода в решении такой непростой геометрической и физико-химической задачи.

*В третьей главе* представлено описание аналогичной работы по построению четырех 3D моделей  $T$ - $x$ - $y$  диаграмм хлоридных систем Na, Mg, U и Pu, завершающейся конструированием 4D модели  $T$ - $x$ - $y$ - $z$  диаграммы четверной системы, которую эти хлориды образуют. В данной главе показана последовательность снижения размерности объектов четырехмерного пространства через 3D изо- и политермические разрезы к привычному 2D измерению и показу рисунка на плоскости. А сравнение 2D модельного разреза с опубликованным ранее и полученным другими авторами позволяет говорить о **достоверности** полученных автором результатов.

Последнее подтверждается также широкой апробацией работы: опубликованием основных результатов исследования в шести статьях, индексируемых в Scopus и Web of

Science, представлением и обсуждением их на международных и всероссийских научных конференциях, поддержкой грантами РФФИ, внедрением результатов работы в учебный процесс.

*Четвертая глава* диссертационной работы М. В. Ламуевой посвящена подробному освещению результатов полиэдрации четверной взаимной фторид-хлоридной системы  $Li, Na, U || F, Cl$ . Актуальность такой работы вызвана необходимостью при подборе материалов для топлива жидкосолевых ядерных реакторов учитывать достоинства одних (например, фторидных) и нивелировать недостатки других (например, хлоридных) галогенидов (либо наоборот). В данном случае рассмотрены четверные подсистемы, которые получаются при тетраэдрации системы  $Li, Na, U || F, Cl$  с конгруэнтно плавящимися соединениями  $3NaF \cdot UF_4$  и  $7NaF \cdot 6UF_4$ . Поскольку достоверно неизвестно, какая из диагоналей систем  $Li, U || F, Cl$  и  $Na, U || F, Cl$  является стабильной, то были рассмотрены все четыре варианта, и один из них был отвергнут, как невозможный с позиций топологической реализуемости, что наглядно подчеркивает эффективность и полезность разработанного автором подхода к геометрическому анализу фазовых диаграмм. В трех остальных случаях было показано, что полиэдрация приводит к пяти четверным системам, и предсказано возможное строение гиперповерхностей ликвидуса этих систем.

*В пятой главе* подробно описана технология прототипирования разборных моделей фазовых диаграмм, 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 техническое задание для прототипирования разборных  $T$ - $x$ - $y$  диаграмм.

*Обсуждение результатов и выводы*, приведенные в тексте диссертационной работы, основаны на наиболее важных полученных автором результатах и полностью обоснованы.

Таким образом, текст диссертационной работы содержит литературный обзор по обозначенной актуальной теме, обоснованную цель, перечень необходимых для ее достижения задач, включает подробное описание примененных методов, результаты построения компьютерных моделей фазовых диаграмм, исходную и производную информацию, которых вполне достаточно для выполнения анализа и представления научно-обоснованных выводов по проведенному исследованию.

## **6 Достоверность и обоснованность полученных результатов**

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов обеспечивается проведением сопоставительного анализа результатов построения пространственных

компьютерных моделей  $T$ - $x$ - $y$  диаграмм и результатов экспериментального исследования фазовых равновесий и термодинамической оптимизации фазовых диаграмм исследуемых объектов. Корректность геометрического строения разработанных моделей подтверждается выполнением основных положений геометрической термодинамики (правила фаз Дж. У. Гиббса, принципов соответствия и непрерывности Н. С. Курнакова, правил о соприкасающихся пространствах состояния Л. С. Палатника, А. И. Ландау и Д. А. Петрова), которые, надо отметить, часто нарушаются при экспериментальном построении фазовых диаграмм и даже при проведении термодинамической оптимизации фазовых равновесий.

Основное содержание работы изложено в 48 публикациях, в том числе в 23 статьях, опубликованных в журналах, рекомендованных ВАК (РИНЦ, Scopus, Web of Science), из них 2 статьи – в журналах, входящих в систему цитирования Web of Science, что является достойным показателем качества проделанной автором работы.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 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 пятерную систему Fe-Ni-Cu-Co-S, для модернизации технологических процессов получения никеля, кобальта и меди» (2017-2019)).

Результаты работы неоднократно представлялись и обсуждались на международных и российских профильных конференциях.

Полученные результаты также могут быть использованы в курсах лекций и учебных пособиях по неорганической и физической химии, кристаллохимии, физике конденсированного состояния, материаловедению.

## **7 Замечания по тексту диссертации**

В ходе подробного анализа диссертационной работы наряду с ее бесспорными достоинствами, нами были обнаружены некоторые пробелы и недостатки, которые хотелось бы отметить:

1) В специализированной литературе очень редко встречается название «расплавно-солевой реактор». Английское название «Molten Salt Reactor» чаще переводится как «реактор на расплавах солей» или «жидкосолевой реактор».

2) Литературный обзор недостаточно подробен с точки зрения описания концепций и возможных вариантов топливных композиций жидкосолевых реакторов. В частности, к реакторам четвертого поколения относят не все проекты жидкосолевых реакторов. Например, исторически первый жидкосолевой реактор – ARE – работал на жидкой

топливной композиции  $\text{NaF-ZrF}_4\text{-UF}_4$  с замедлителем  $\text{BeO}$  и натриевым теплоносителем второго контура в 1950-х годах. Перспективным же компонентом жидкосолевого топлива для реакторов IV поколения является фторид тория. Таким образом, выбор компонентного состава для проведенного исследования остается не до конца раскрытым. Целесообразно было бы привести более подробную аргументацию в пользу выбранных систем с позиций исторической ретроспективы и анализа систем-кандидатов, считающихся наиболее перспективными сегодня.

3) В литературном обзоре полностью отсутствует описание истории возникновения и развития техники диаграмм состояния. Не приведено информации об альтернативных подходах к построению и оптимизации фазовых диаграмм, анализу достоинств и недостатков существующих программных продуктов. Это было бы крайне полезным сделать для подчеркивания особенностей и достоинств разработанного автором подхода и построенных им моделей!

4) В процессе работы реакторной установки в результате реакций деления происходит наработка продуктов деления. В этом отношении концепция реакторов на расплавах солей очень привлекательна, так как потенциально позволяет очищать от продуктов деления топливную композицию непосредственно в процессе работы реактора. Анализировал ли автор такую возможность с точки зрения использования данных о фазовых равновесиях и построенных им пространственных моделей для разработки такой технологии?

5) Понятно, что до реализации настоящего исследования хоть сколько-нибудь полных пространственных моделей исследуемых систем просто не существовало. Но крайне полезным было бы приведение результатов сопоставительного анализа политермических и изотермических разрезов, имеющих в литературе, с разрезами построенных автором моделей. И такой анализ автором приведен, но только в одном случае изотермического разреза системы  $\text{UCl}_3\text{-NaCl-PuCl}_3$ . Этого явно недостаточно для подчеркивания достоинств проведенной работы.

6) Проведенный анализ и конструирование модели смешанных фторидно-хлоридных систем впечатляет, но насколько реально внедрение такой смешанной композиции в практику?

7) Было бы крайне полезным иметь хотя бы демонстрационную версию одной из разработанных моделей в виде свободно распространяемого приложения или апплета на сайте научной группы автора. Необходима популяризация подхода и привлечение внимания профильных специалистов для того, чтобы эффективно развивать и совершенствовать это замечательное и потенциально очень перспективное направление исследований.

### **Заключение о соответствии диссертационной работы**

Диссертационная работа М. В. Ламуевой «Верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм и полиэдрация концентрационных комплексов в задачах разработки материалов расплавно-солевого реактора 4-го поколения», несмотря на отмеченные замечания, представляет собой самостоятельную, цельную, хорошо структурированную, логически выстроенную и завершенную работу, выполненную на актуальную тему.

Материал диссертационной работы соответствует поставленной цели исследования, а полученные результаты полностью решают поставленные в работе задачи.

Содержание диссертационной работы М. В. Ламуевой полностью соответствует пунктам 5 (разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения) и 7 (технические и технологические приложения физики конденсированного состояния) паспорта специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

### **Заключение о соответствии диссертационной работы требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней»**


Диссертационная работа М. В. Ламуевой «Верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм и полиэдрация концентрационных комплексов в задачах разработки материалов расплавно-солевого реактора 4-го поколения», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния, по своему содержанию, структуре, завершенности, обоснованию теоретических положений и возможности практического использования результатов полностью удовлетворяет всем требованиям п.п. 9-14 (раздел II) «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842, ред. 01.10.2018 г., а ее автор, Марина Владимировна Ламуева, бесспорно, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Отзыв ведущей организации на диссертацию Ламуевой Марины Владимировны подготовлен кандидатом химических наук, начальником отдела исследований тяжелых аварий ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» Альмяшевым Вячеславом Исхаковичем; доктором технических наук, профессором, Заслуженным деятелем науки Российской Федерации, главным научным сотрудником ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» Хабенским Владимиром Бенциановичем; кандидатом технических наук, заведующим

лабораторией физико-химических исследований кориума ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» Витолем Сергеем Александровичем.

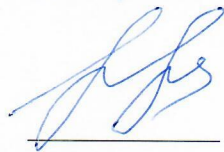
Результаты диссертационной работы, автореферат и отзыв на диссертацию были обсуждены и одобрены на заседании секции НТС «Расчетные и экспериментальные исследования в атомной энергетике» ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» «03» декабря 2021 г., протокол №49.

Начальник отдела  
исследований тяжелых аварий  
ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», к.х.н.

  
03 декабря 2021 г.


Альмяшев  
Вячеслав  
Исхакович

Главный научный сотрудник  
ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», д.т.н.,  
проф., Заслуженный деятель науки РФ

  
03 декабря 2021 г.

Хабенский  
Владимир  
Бенцианович

Заведующий лабораторией  
физико-химических исследований кориума  
ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», к.т.н.

  
03 декабря 2021 г.

Витоль  
Сергей  
Александрович

Федеральное государственное унитарное предприятие  
«Научно-исследовательский технологический институт имени А.П. Александрова»  
(ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова»)  
Копорское шоссе, д. 72,  
г. Сосновый Бор, Ленинградская область, 188540  
т.: +7 81369 22667 (секретариат)  
факс: +7 81369 23672  
E-mail: [foton@niti.ru](mailto:foton@niti.ru)  
Сайт: <https://niti.ru/>

Мы, Альмяшев Вячеслав Исхакович, начальник отдела исследований тяжелых аварий ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», Хабенский Владимир Бенцианович, главный научный сотрудник ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», Витоль Сергей Александрович, заведующий лабораторией физико-химических исследований кориума ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» даем согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Подписи начальника отдела исследований тяжелых аварий ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» В. И. Альмяшева, главного научного сотрудника ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» В. Б. Хабенского, заведующего лабораторией физико-химических исследований кориума ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова» С. А. Витоля удостоверяю:

Заместитель генерального директора  
по гражданской продукции,  
Ученый секретарь НТС



А. И. Дмитриев

03 декабря 2021 г.