

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 24.2.306.01 НА БАЗЕ
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Иркутский государственный университет»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от «24» декабря 2021 г. № 17

О присуждении Ламуевой Марине Владимировне, гражданке РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Верификация разрезов многомерных фазовых диаграмм и полиэдрация концентрационных комплексов в задачах разработки материалов расплавно-солевого реактора 4-го поколения» по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния принята к защите 15 октября 2020 г., протокол №12, диссертационным советом Д 24.2.306.01 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (664003, г. Иркутск, бульвар Гагарина, д. 20, приказ Рособнадзора о создании диссертационного совета № 1634–894 от 13.07.2007 г.).

Соискатель, Ламуева Марина Владимировна, 1986 года рождения. В 2008 году окончила с отличием специалитет Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Бурятский государственный университет» по специальности «Математика». В 2021 году окончила обучение в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук по специальности 09.06.01 - Информатика и вычислительная техника. Сдала кандидатские экзамены по этой специальности. Дополнительно сдала кандидатский экзамен по

специальности 1.3.8 (01.04.07) – физика конденсированного состояния в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук. Работает главным бухгалтером в ООО «Рэд Бокс».

Диссертация выполнена в секторе компьютерного конструирования материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель- доктор химических наук, Луцык Василий Иванович, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физического материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, сектор компьютерного конструирования материалов, заведующий.

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");

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

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное унитарное предприятие "Научно-исследовательский технологический институт имени А.П. Александрова" (ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова»), Ленинградская область, Сосновый Бор - в своём положительном заключении, подписанном Альмяшевым Вячеславом Исхаковичем, кандидатом химических наук, начальником отдела исследований тяжелых аварий ФГУП «НИТИ им. А.П.Александрова», Хабенским Владимиром Бенциановичем, доктором

технических наук, профессором, Заслуженным деятелем науки РФ, главным научным сотрудником ФГУП «НИТИ им. А.П.Александрова», и Витолем Сергеем Александровичем, кандидатом технических наук, заведующим лабораторией физико-химических исследований кориума ФГУП «НИТИ им. А.П.Александрова», и утверждённом Василенко Вячеславом Андреевичем, доктором технических наук, профессором, председателем НТС, научным руководителем ФГУП «НИТИ им. А.П.Александрова», указала, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует пункту 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор, Ламуева Марина Владимировна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 48 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 18 работ общим объёмом 8,06 печ. л.: из них 6 статей в журналах, включённых ВАК РФ в «Перечень ведущих рецензируемых журналов», и 16 в тезисах докладов всероссийских и международных конференций и других изданиях. В работах представлены результаты компьютерного моделирования фазовых диаграмм четверных систем $\text{LiF-NaF-CaF}_2\text{-LaF}_3$ и $\text{UCl}_3\text{-NaCl-MgCl}_2\text{-PuCl}_3$, и тройных, содержащихся на их ограничении, предложена полиэдризация четверной фторид-хлоридной взаимной системы Li,Na,U||F,Cl для получения материалов, характеризующихся как топливо ядерных реакторов IV поколения.

В диссертации не обнаружены недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, авторском вкладе и объеме научных изданий.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Lutsyk V.I., Vorob'eva V.P., Sumkina O.G., Lamueva M.V. Polyhedration of Multicomponent Mineral Systems / V.I.Lutsyk, V.P.Vorobeva, O.G.Sumkina,

M.V.Lamueva //IFAC Proceedings Volumes (IFAC-PapersOnline).- 2013.- 15 (PART 1).- P. 288-293 (Scopus: CiteScore 2.1, SJR 0.308, SNIP 20200.520).

2. Lutsyk V.I., Zelenaya A.E., Lamueva M.V. 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: CiteScore 0.7, SJR 0.210, SNIP 0.464).

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 (импакт-фактор РИНЦ: 0,964; Scopus: CiteScore 0.2).

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: CiteScore 0.7, SJR 0.198, SNIP 0.484).

5. Lutsyk V.I., Vorob'eva V.P., Zelenaya A.E., Lamueva M.V. T-x-y 3D Computer Model of the Co-Cu-CoS-Cu₂S Subsystem T-x-y Diagram Above 800oC / V.I.Lutsyk, V.P.Vorob'eva, A.E.Zelenaya, M.V.Lamueva //Journal of Mining and Metallurgy. Section B: Metallurgy. – 2021. – V. 57. - Is. 3. – P. 319-329. <https://doi.org/10.2298/JMMB190307028L> (Scopus: CiteScore 2.3, SJR 0.420, SNIP 0.825).

6. Vorob'eva V.P., Zelenaya A.E., Lutsyk V.I., Lamueva M.V. A 3D Computer Model of the CaO-MgO-Al₂O₃ T-x-y Diagram at Temperatures above 1300°C / V.P.Vorob'eva, A.E.Zelenaya, V.I.Lutsyk, M.V.Lamueva //Condensed Matter and Interphases. - 2021. - V.23. - No.3. - P. 380 - 386; <https://doi.org/10.17308/kcmf.2021.23/3529> (импакт-фактор РИНЦ: 0,452).

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

Официальный оппонент *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").

Замечания: 1) В ходе выполнения диссертационной работы соискатель использовал программы «Редактор фазовых диаграмм» (PD Editor) и «Конструктор фазовых диаграмм» (PD Designer) (автореферат, С.5). Однако, из диссертационной работы неясно, чем обусловлен выбор именно этих программ. Так же было бы полезным дать краткий сравнительный анализ этих программ с альтернативным коммерческим программным обеспечением для термодинамического моделирования фазовых диаграмм. 2) Формулируя основные результаты диссертационной работы, автор утверждает (автореферат, С. 18, п.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». Неясно, какой смысл автор вкладывает в термин «технология». На мой взгляд, термин «методология» был бы более удачным и точным. 3) Имеются замечания по оформлению работы. Так, в частности, статус публикации соискателя [5] (автореферат, С. 19) указан «принято к печати». Общее количество литературных источников в диссертации - 127, а в автореферате (С.7) - 126. В диссертационной работе нарушена нумерация ссылок: на С. 11 после ранее встречающихся в тексте ссылок [1-10] возникает ссылка [29], на С. 13 после ранее встречающихся в тексте ссылок [1-30] возникают ссылки [45-48] и т.д.

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

Замечания: 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 Т-х, Т-х-у, Т-х-у-*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 «-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. 3) Редакционные замечания: смещение различных шкал для обозначения температуры (стр. 31), 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.

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

Замечания: 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 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 $UCl_3-NaCl-PuCl_3$. 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.

Отзывы на автореферат:

1. *Базаров Баир Гармаевич*, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории оксидных систем Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Байкальский институт природопользования Сибирского отделения Российской академии наук.

Замечания: 1) Немного настораживает корректность компьютерных моделей фазовых диаграмм с участием фторида кальция, поскольку слишком противоречивы мнения авторов о наличии у него, либо отсутствии полиморфизма.

2. *Туровцев Владимир Владимирович*, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики, математики и медицинской информатики ФГБОУ ВО «Тверской государственной медицинской академии» Министерства здравоохранения Российской Федерации.

Замечания: 1) На рис.6в имеется лишняя подпись «LiCl», было бы более удачным это обозначение заменить на « UCl_3 ». 2) На стр.19 в названии опубликованной работы под номером 5 надо удалить слово «Т-х-у» и указать номер журнала (3) и страницы: 319-329.

3. *Хина Борис Борисович*, доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник лаборатории высоких давлений и специальных сплавов Физико-технического института НАН Беларуси. Замечания: 1) На

стр.15 и рис.5 на примере изотермического разреза при 873 К системы UCl_3 – $NaCl$ – $MgCl_2$ – $PuCl_3$ показано, что построенная 4D модель дает результат, адекватный полученному в литературе термодинамическим расчетом. Было бы желательно привести пример того, как предложенный подход позволяет уточнить имеющиеся экспериментальные или расчетные фрагменты диаграмм состояния.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается широкой известностью их достижений в области физики конденсированного состояния, наличием публикаций по данному направлению, а также способностью определить научную и практическую значимость диссертационной работы. Официальный оппонент доктор физико-математических наук, доцент, *Захаров М.А.* – известный учёный в области построения решеточных моделей многокомпонентных твердых растворов, химической термодинамики, а также методов расчета фазовых диаграмм, имеет более 60 научных работ, в том числе более 40 статей в высокорейтинговых российских и зарубежных журналах. Официальный оппонент кандидат физико-математических наук, *Богданов А.И.* – высококвалифицированный специалист в области изучения атомной структуры и фазового состава ферроэлектрических керамических материалов, имеет 10 статей в авторитетных российских и зарубежных изданиях. Ведущая организация – *Федеральное государственное унитарное предприятие "Научно-исследовательский технологический институт имени А.П. Александрова"* (ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова»), Ленинградская область, Сосновый Бор – единственный в России научно-технологический центр комплексных испытаний транспортных ЯЭУ, доведения их на полномасштабных стендах-прототипах до требуемого уровня надежности и безопасности и сопровождения их эксплуатации в течение всего жизненного цикла, а доктор технических наук *Хабенский В.Б.*, кандидат химических наук *Альмяшев В.И.* и кандидат технических наук *Витоль С.А.* – высококвалифицированные учёные, работающие в сфере экспериментальных исследований тяжелых аварий на

атомных электростанциях, в частности, в области исследования фазовых равновесий кориумных систем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований: **показано**, что пространственные компьютерные модели T-x-y и T-x-y-z диаграмм можно использовать для проверки достоверности результатов термодинамических расчетов и построенных по экспериментальным данным изотермических и политермических разрезов; **предложена** методика построения схем ди-, моно- и нонвариантных состояний для вывода и описания геометрического строения T-x-y-z диаграмм четырехкомпонентных систем, позволяющая выполнить прогноз топологических типов фазовых диаграмм и возможных фазовых превращений в четверных системах при минимуме экспериментальных данных.

Теоретическая значимость исследования обусловлена тем что, **показано**, что усложнение 3D моделей T-x-y диаграмм четырех тройных систем на огранении четверной системы происходит в следующей очередности: для фторидных систем - LiF-NaF-CaF₂ (0;35;17), LiF-CaF₂-LaF₃ (0;47;20), LiF-NaF-LaF₃ (1;47;20), NaF-CaF₂-LaF₃ (1;74;28), для хлоридных систем - UCl₃-NaCl-PuCl₃ (0;9;6) и UCl₃-MgCl₂-PuCl₃ (0;9;6) имеют одинаковую конструкцию, UCl₃-NaCl-MgCl₂ (2;66;27) и NaCl-MgCl₂-PuCl₃ (2;66;27) тоже имеют одинаковую конструкцию; 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, фторидная – из 169-ти гиперповерхностей и 62-х фазовых областей, для фторида кальция даны границы фазовых областей с участием двух его полиморфных модификаций, **проведена** тетраэдрация четверной взаимной системы Li,Na,U||F,Cl с конгруэнтно плавящимися соединениями 3NaF·UF₄ (R1) и 7NaF·6UF₄ (R2) с последующей сборкой одиннадцати образующихся T-x-y-z диаграмм для четверных подсистем, **применительно к проблематике диссертации результативно использована** методика вывода геометрического строения T-

x-y и T-x-y-z диаграмм из схем (ди- для четверных), моно- и невариантных состояний, для построения прототипа и последующего его превращения в 3D или в 4D, соответственно, модель реальной системы.

Значения полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что: для расшифровки/кодирования геометрического строения T-x-y-z диаграмм разработаны табличные и пространственные схемы ди-, моно- и невариантных состояний; **построены** 3D компьютерные модели T-x-y диаграмм тройных систем, формирующих четверные системы LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ и UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃, 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, имитацией ДТА-спектров кристаллизующегося расплава; на основании данных по тройным системам **выполнен** прогноз геометрического строения T-x-y-z диаграмм LiF-NaF-CaF₂-LaF₃ и UCl₃-NaCl-MgCl₂-PuCl₃ и **построены** 4D компьютерные модели, хорошо воспроизводящие эксперимент, что говорит об их адекватности; дан прогноз геометрического строения T-x-y-z диаграмм подсистем 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, где R1 и R2 – конгруэнтно плавящиеся соединения 3NaF · UF₄ и 7NaF · 6UF₄, полученных при полиэдрации взаимной системы Li,Na,U||F,Cl; 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.

Оценка достоверности результатов исследования выявила: достоверность и обоснованность построенных 3D и 4D компьютерных

моделей фазовых диаграмм **подтверждена** сопоставлением с экспериментальными изо- и политермическими разрезами и проекциями ликвидуса. Корректность их геометрического строения **подтверждена** выполнением основных положений геометрической термодинамики (правила фаз, принципов соответствия и непрерывности, правила о соприкасающихся пространствах состояния). Для расширения масштаба оценки применяемой методики моделирования T-x-y и T-x-y-z диаграмм проводилась обработка экспериментальных и термодинамических данных не только для фторид-хлоридных систем, но также и для оксидных и металлических систем.

Личный вклад соискателя состоит в его непосредственном участии в выполнении анализа литературных данных, построении 3D и 4D компьютерных моделей фазовых диаграмм фторидных и хлоридных систем, описанных в диссертации в главах 2 и 3, в подготовке публикаций по выполненной работе, а также в представлении результатов исследований на различных международных и всероссийских научных мероприятиях.

Диссертационный совет пришёл к выводу, что диссертация Ламуевой М.В. является законченным научным исследованием, выполненным по актуальной тематике, результаты которого имеют высокую научную и практическую значимость. Работа соответствует специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния и пункту 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а также отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

На заседании 24 декабря 2021 г. диссертационный совет принял решение присудить Ламуевой М.В. учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 6 докторов по специальности 1.3.8 (01.04.07) – физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 22

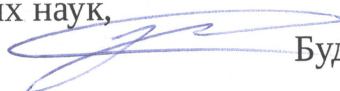
человек, входящих в совет, проголосовали: за – 15, против – 0,
недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета Д 24.2.306.01,

доктор физико-математических наук,

старший научный сотрудник



Буднев Николай Михайлович

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 24.2.306.01,

доктор физико-математических наук,

профессор



Аграфонов Юрий Васильевич

24 декабря 2021 г.