



Відгук

офіційного опонента

на дисертацію **КОНДРІ Маріанни Сергіївни**

«Мультимасштабне моделювання кінетики точкових дефектів в реакторних металах», представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Актуальність теми дисертації. Вже більш ніж 120 років однією з центральних проблем фізики твердого тіла залишається вплив опромінення на структуру та властивості конструкційних матеріалів. Особливо важливим це питання є для корпусів реакторів атомних станцій, які опромінюються потоком нейтронів високих енергій протягом усього часу їх експлуатації. Безпосереднє експериментальне дослідження процесів, які відбуваються у корпусі реактора і можуть привести до його так званого нейтронного окрихчення, неможливі, внаслідок високого рівня нейтронного опромінення. Використання зразків-свідків іонного опромінення та досліджень у науково-дослідних реакторах для визначення «життєвого ресурсу» корпусів промислових атомних реакторів є доцільним, але потребує ретельного моделювання фізичних процесів у реакторі від так званої каскадної стадії, що триває декілька пікосекунд, до дифузної стадії руху дефектів та створення їх кластерів, яка може тривати від декількох хвилин до декількох років і далі до стадії, на якій відбувається взаємодія дислокації зі створеними під опроміненням кластерами, що приводить до зміни механічних властивостей корпусу реактора. Найбільш ефективним підходом до дослідження цієї багаторівневої проблеми є мультимасштабний підхід. У даний час достатньо інтенсивно досліджується процеси на каскадній стадії методом молекулярної динаміки, методом Монте-Карло та методом ab-initio. Також відомі результати щодо розрахунку зміни механічних властивостей матеріалів внаслідок взаємодії дислокацій з перешкодами їх руху у вигляді кластерів або преципітатів, які виникають під опроміненням. Але дотепер бракує досліджень щодо еволюції кластерів дефектів на дифузійній стадії. Ось чому

актуальність теми дисертаційних досліджень Кондрі Маріанни Сергіївни «Мультимасштабне моделювання кінетики точкових дефектів в реакторних металах», де метод кластерної динаміки застосовується до визначення часової еволюції функцій розподілу кластерів вакансій та кластерів міжвузлів, не визиває сумніву.

Обґрунтованість і достовірність наукових результатів підтверджується надійністю комп'ютерного коду, що реалізує метод кластерної динаміки для інтегрування системи жорстких звичайних диференціальних рівнянь, з порівняння результатів моделювання з експериментальними даними; відповідністю загальноприйнятим уявленням фізики твердого тіла.

Публікації. Усього за темою дисертації опубліковано 15 друкованих праць, у тому числі 1 - у зарубіжному періодичному виданні, що індексується базою даних Scopus та 6 статей у періодичних виданнях, рекомендованих МОН України для публікації матеріалів дисертацій на здобуття вчених ступенів по фізико-математичним наукам, з них - 2 статті у виданнях, що індексуються базою даних Scopus. Решта публікацій - тези та матеріали республіканських та міжнародних науково-технічних конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел, що складається із 215 найменувань. Повний обсяг роботи становить 151 сторінку друкованого тексту, що містить 15 таблиць та 59 рисунків.

Вступ містить усі обов'язкові пункти, які сформульовано достатньо чітко, предметно та відповідно до діючих умов. У вступі обґрунтовано тематику досліджень, визначено об'єкт та предмет дослідження, обрано методи дослідження. Сформульовано мету і завдання, наукову новизну, окреслено практичне значення отриманих результатів. Наведено дані про результати досліджень, вказано на особистий внесок автора у визначенні результатів, винесених на захист. Представлено структуру дисертації.

У першому розділі проаналізовано фізичні принципи методу кластерної динаміки (КД), наводяться приклади застосування КД до опромінюваних матеріалів, обґрунтовано модифікацію комп'ютерного коду для реалізації КД у представленій дисертації. Особливу увагу приділено визначенню параметрів моделей КД з експерименту.

У другому розділі досліджено роль флаксу (потужності опромінення), а саме розглядаються питання: вплив опромінення на структуру та властивості матеріалу залежить тільки від дози (флюенсу опромінення) або додатково і від флаксу? Зазначена проблема має не тільки теоретичне, але і прикладне значення у зв'язку з тим, що багаточисленні дослідження стабільного функціонування у часі як фізичних приладів (наприклад, напівпровідникових сенсорів у космічному просторі), так і технічних конструкцій (корпусів атомних станцій та оболонок тепловиділяючих елементів в атомному реакторі), використовуються для довгострокових прогнозів на основі короткочасних випробувань, коли флакс збільшується в тисячі та мільйони разів для досягнень відповідного флюенсу.

У третьому розділі методом КД досліджено вплив зміни температури на структуру та механічні властивості корпусу атомного реактора. Визначалось як змінюються середній розмір і чисельна щільність вакансійних кластерів та кластерів міжвузел і відповідно межі текучості матеріалу у випадку зміни температури науково-дослідного реактора БР2 (м. Мол, Бельгія).

Також за підходом Марголіна Б.З. оцінювалась еволюція відносної площі пор у α -залізі під опроміненням.

У четвертому розділі розглядається питання щодо розмірності дифузії міжвузел у вольфрамі. Методом КД моделюється процеси відновлення вольфраму, що був опромінений електронами, шляхом ізохронного відпалу.

Спеціальна увага приділяється впливу вуглеця на кінетику точкових дефектів. Результати моделювання порівнюються з даними експерименту. Для визначення ефекту розмірності дифузії міжвузельного атому модель КД

для ОЦК заліза з домішками модифікується до вольфраму, легованого вуглецем. Записано майстер-рівняння КД, що додатково враховує мобільність вакансійних кластерів з максимальним вмістом до чотирьох вакансій.

Дисертація написана грамотною українською мовою. Результати викладено чітку і зрозуміло.

Оцінюючи роботу в цілому, треба зазначити наступне: дисертаційна робота Кондрі М.С. «Мультимасштабне моделювання кінетики точкових дефектів в реакторних металах» є завершеною науковою працею.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що:

1. Модифіковано комп'ютерний код, який дозволяє проводити моделювання кінетики поодиноких вакансій та міжвузлів, вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів з урахуванням різниці їх характерних часів у конструкційних реакторних матеріалах під електронним, іонним та нейтронним опромінюваннями.

2. Знайдено три режими залежності від флаксу середнього розміру і чисельної щільності вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів у чистому залізі, які відповідають двом критичним значенням флаксу $6,9 \times 10^{-9}$ дпа/с і $1,70 \times 10^{-7}$ дпа/с для обох флюенсів 0,026 дпа та 0,19 дпа. У першому і третьому зазначених режимах спостерігаються близькі значення середнього розміру кластерів міжвузлів D_{SIAC} , що дозволяє використовувати дані, які отримано на науково-дослідному реакторі або при іонному опроміненні, для прогнозування значення D_{SIAC} у промисловому атомному реакторі за умови одного і того ж флюенсу.

3. Визначено, що залежність індукованого опроміненням зміцнення від флаксу для чистого α -заліза, має два режими з критичним значенням $1,70 \times 10^{-7}$ дпа/с ($1,10 \times 10^{14}$ н/м²/с). Досягнуто відповідність даних моделювання до експериментально знайденого збільшення межі текучості заліза при флюенсах нейтронного опромінення 0,026 і 0,19 дпа.

4. Показано можливість використання результату кластерної динаміки щодо збільшення межі текучості, індукованого опроміненням, до оцінки зміни механічної стабільності конструкційних реакторних матеріалів у межах фізико-механічної моделі міжзеренного руйнування, яке спричинено еволюцією пор, за підходом Б. З. Марголіна.

5. Зроблено висновок щодо 1D розмірності дифузії міжвузельних атомів у вольфрамі, що опромінено електронами, із порівняння експериментальних даних про ізохронний відпал вольфраму з результатами моделювання методом кластерної динаміки для моделей з 1D дифузією та 3D дифузією міжвузельних атомів.

Отримані в роботі результати мають **практичне значення**. Так, в результаті досліджень встановлено:

1. Модифікований метод кластерної динаміки може бути застосовано для дослідження кінетики точкових дефектів та їх кластерів у чистих металах у процесі їх електронного, іонного та нейтронного опромінення, а також для визначення відповідного внеску до зміни механічних властивостей сплавів зазначених металів.

2. Результати щодо впливу флаксу на кінетику вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів можуть бути використані у процесі прогнозування кінетики процесів у реакторних матеріалах протягом штатного та поширеного часу їх експлуатації (до 40-60 років) на основі даних короткотривалого іонного опромінення та опромінення нейтронами у науково-дослідних атомних реакторах.

3. Результати моделювання методом кластерної динаміки щодо зміни механічних властивостей опромінених реакторних матеріалів внаслідок зміни температури можуть бути використані для оцінки зміни механічних властивостей корпусу реактора під час нештатних ситуацій, що спричинено зміною температури теплоносія.

4. Результати моделювання методом кластерної динаміки кінетики точкових дефектів у вольфрамі щодо впливу вуглецю та розмірності міграції

міжвузельних атомів можуть бути враховані у процесі дослідження зміни механічних властивостей вольфраму та його сплавів під опромінюванням.

Дисертаційна робота виконана на високому науковому рівні. Разом з тим вважаю за необхідне висловити певні зауваження до роботи:

1. У першому розділі недостатньо повно наведена інформація щодо особливостей потенціалу взаємодії між точковими дефектами у металах, які сприяють утворенню їх кластерів.

2. У другому розділі відсутнє всебічне обговорення методу оцінки зміни межі текучості заліза внаслідок утворення кластерів точкових дефектів у залізі під опроміненням.

3. У третьому розділі отримані деякі результати щодо впливу опромінення на еволюцію пор у залізі, але відсутній кількісні дані про руйнування опромінених матеріалів за критеріальним підходом Марголіна Б.З.

4. Припущення про 1D розмірність дифузії та урахування впливу вуглецю у четвертому розділі дозволило автору відтворити у моделювання методом КД перший експериментальний пік відновлення електричного опору вольфраму після електронного опромінення. Але збігання результатів моделювання та експерименту для другого піку відновлення є незадовільним з моєї точки зору.

5. Основні результати дисертації отримані для комерційного чистих заліза та вольфраму. В дисертації треба було більш повно пояснити яким чином вони можуть бути використанні для сплавів цих металів

Однак, зазначені зауваження не знижують загальну наукову цінність дисертації М. С. Кондрі. За змістом дисертаційна робота Кондрі Маріанни Сергіївни «Мультимасштабне моделювання кінетики точкових дефектів в реакторних металах» повністю відповідає спеціальності 01.04.07- фізика твердого тіла. Вона є завершеною самостійною науковою працею.

Автореферат дисертації відображає її основний зміст. У авторефераті аргументовано пояснено актуальність теми на мету роботи, змістовно розкрито фізичні основи отриманих результатів.

Висновок.

Дисертаційна робота Кондрі М. С. є завершеним дослідженням, які містить нові фізичні результати. Можна стверджувати, що за об'ємом та якістю результатів, їхньої апробацією на наукових конференціях та у наукових виданнях, дисертаційна робота «Мультимасштабне моделювання кінетики точкових дефектів в реакторних металах» повністю відповідає всім вимогам «Порядку присудження наукових ступенів» щодо кандидатських дисертацій, а її автор Кондря Маріанна Сергіївна заслуговує присудження йому ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, професор,
Одеський національний університет
імені І. І. Мечникова.

О. В. Тюрин

Підпис Тюрин О. В. завіряю.

Вчений секретар Одеського національного
університету імені І. І. Мечникова



С. В. Курандо