

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Бордулева Юрия Сергеевича «Водород-индуцированные дефекты в сплаве  $Zr_{1\%}Nb$ », представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

### **Актуальность темы диссертации**

В настоящее время изделия из сплавов циркония используются в активных зонах водоохлаждаемых энергетических реакторов на тепловых нейтронах. В процессе эксплуатации сплавы циркония подвержены наводороживанию. Проникновение водорода в материал сопровождается расширением кристаллической решетки, образованием структурных дефектов (водород-индуцированные дефекты), а также их взаимодействием с уже имеющимися дефектами. Известно, что разветвленная дефектная структура увеличивает сорбцию водорода в материале, что приводит к образованию гидридных фаз и, как следствие, охрупчиванию и разрушению материала. Поэтому понимание вопросов возникновения и эволюции дефектов под действием водорода представляет не только фундаментальный, но и практический интерес у исследователей-материаловедов в области ядерной энергетики.

Среди имеющихся методов исследования структурных дефектов в материалах, в том числе и в системах металл-водород, одним из самых чувствительных является метод аннигиляции позитронов. Однако этот метод обладает некоторой сложностью, связанной с математической обработкой и интерпретацией полученного результата. В этой связи является необходимым установление таких базовых характеристик аннигиляции позитронов, как время жизни и коэффициент захвата позитронов в окрестностях различных типов дефектов.

Сказанное выше свидетельствует о том, что диссертационная работа Ю. С. Бордулева, посвященная теоретическому и экспериментальному определению базовых характеристик аннигиляции позитронов, а также установлению закономерностей эволюции дефектной и кристаллической структуры в сплаве  $Zr_{1\%}Nb$  при водородном насыщении является актуальной.

### **Структура и содержание диссертации.**

Диссертационная работа Ю. С. Бордулева состоит из введения, четырех глав, заключения и списка используемой литературы из 205 наименования. Общий объем диссертации 128 страниц, включая 45 рисунков, 4 таблицы.

**Во введении** обоснована актуальность решаемой проблемы, сформулированы цель, задачи и положения, выносимые на защиту; показана новизна и практическая значимость полученных результатов; даны сведения о публикациях и об апробации работы.

**В первой главе** «Взаимодействие водорода с циркониевыми сплавами и его влияние на их свойства» рассмотрены вопросы взаимодействия водорода

с циркониевыми сплавами и образования водород-индуцированных дефектов в металлах и сплавах. Изложены физические основы поведения позитронов в твердых телах. Проведен обзор основных результатов, достигнутых в области применения метода позитронной аннигиляции для исследования дефектов водородного происхождения. На основе анализа литературных данных обоснованы цель и задачи диссертационного исследования.

**Во второй главе** «Материалы и методы исследования» приводятся подробное описание методов и характеристик установок, использованных в работе для экспериментальных исследований структуры и дефектов в системе Zr-H, что позволяет судить о достоверности полученных результатов. Представлена модель, используемая в работе для моделирования поведения позитронов в системе Zr-H и оценки параметров аннигиляции позитронов из первых принципов с применением теории функционала электронной плотности и приближения псевдопотенциала спроецированных волн.

**В третьей главе** «Определение основных параметров позитронной аннигиляции в водород-индуцированных дефектах сплава Zr1%Nb» представлены результаты расчетов параметров аннигиляции позитронов в таких типах дефектов водородного происхождения, как водород-вакансионные комплексы и дислокации. Показано, что увеличение объема кристаллической решетки циркония в результате наводораживания приводит к увеличению времени жизни позитронов по линейному закону. Определены значения времени жизни (217 пс) и коэффициента захвата позитронов ( $9,12 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$ ), локализованных в дислокациях циркония.

**Четвертая глава** «Экспериментальное исследование влияния водорода на дефектную структуру сплава Zr1%Nb» посвящена исследованию влияния насыщения водородом до концентрации 0,064 мас.% на эволюцию дефектной структуры в сплаве Zr1%Nb. Показано, что при насыщении водородом до концентрации 0,015 мас.% в цирконии происходит образование термодинамически неравновесных водород-вакансионных комплексов типа V-H и V-2H. При насыщении водородом в диапазоне концентраций 0,023 - 0,061 масс. % доминирующим типом дефектов являются дислокации.

**В заключении** приведены основные выводы по диссертационной работе.

### **Научная новизна, обоснованность и достоверность положений и выводов диссертации**

К наиболее важным результатам, полученным в работе, можно отнести следующие:

– Установлена закономерность влияния объема решетки циркония на время жизни позитронов.

– Для сплава Zr1%Nb определены основные параметры аннигиляции (время жизни и коэффициент захвата) позитронов, локализованных в дислокациях.

– Установлена закономерность эволюции дефектной структуры сплава  $Zr1\%Nb$  при насыщении водородом до концентрации 0,064 мас. %.

**Практическая значимость** работы Ю. С. Бордулева заключается в том, что полученные в ней значения параметров аннигиляции позитронов в дислокациях и водород-вакансионных комплексах применимы для качественного и количественного анализа с использованием позитронной спектроскопии дефектной структуры циркониевых материалов, подвергнутых механической и водородной обработкам.

Достоверность полученных в работе результатов и обоснованность выводов и положений, выносимых на защиту, была обеспечена высоким уровнем экспериментальных исследований с применением современных методов, включающих методы: электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и позитронной спектроскопии.

Результаты диссертации обсуждены на международных и всероссийских конференциях и опубликованы в 9 статьях в журналах из списка SCOPUS, 4 статьях из перечня ВАК РФ, также в материалах конференций. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертационной работы.

#### **Критические замечания**

В качестве замечаний к диссертации можно отметить следующее:

1. В работе для моделирования поведения позитрона в цирконии используется решетка циркония, в которой растворен один атом водорода (рис. 14, а). Не ясно, на каком основании автор делает вывод о влиянии концентрации растворенного водорода на время жизни позитрона в решетке циркония (стр. 70).

2. В выводах к гл. 4 (стр. 107) увеличение плотности дислокаций в сплаве  $Zr1\%Nb$  при насыщении водородом в диапазоне концентраций 0,023-0,061 мас. % автор связывает с процессом образования гидридной фазы. Однако в положении 1, выносимом на защиту, указано, что растворение водорода в решетке сплава  $Zr1\%Nb$  прекращается при концентрации водорода более 0,061 мас. %. Методом рентгеноструктурного анализа гидридная фаза в сплаве  $Zr1\%Nb$  в работе была обнаружена только при концентрации водорода 0,064 мас. %.

3. К сожалению, при оформлении диссертации не удалось избежать опечаток. У некоторых формул отсутствует нумерация, что затрудняет восприятие материала (например: стр. 52, 97, 105).

#### **Заключение**

Несмотря на сделанные замечания, диссертационная работа Ю. С. Бордулева представляет собой завершённое исследование на актуальную тему, расширяющее представление о возможностях использования методов позитронной спектроскопии для анализа дефектной структуры материалов при насыщении водородом.

По объёму и актуальности выполненных исследований, уровню научной новизны и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Ю. С. Бордулева соответствует п. 8 Порядка

присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете, а сам диссертант заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Института физики  
прочности и материаловедения Сибирского  
отделения Российской академии наук  
(ИФПМ СО РАН)

Грабовецкая Галина Петровна

31.01.20

Подпись Г.П. Грабовецкой удостоверяю.  
Ученый секретарь ИФПМ СО РАН  
к.ф.-м.н.



Н.Ю. Матолыгина

Адрес: 634055, Россия, г. Томск, пр. Академический, 2/4.  
Р.тел. 8(3822)286-949, E-mail: grabg@ispms.tsc.ru