

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Толчиной Дарьи Борисовны** на тему: «Атомное строение наночастиц PtCu в электрокатализаторах PtCu/C и магнитных центров азота в углеродных наноструктурах», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Толчиной Д.Б. представляет собой фундаментальное исследование, посвященное решению актуальной научной проблемы определения атомной структуры сложных низкоразмерных систем – биметаллических наночастиц PtCu в электрокатализаторах и азот-допированных углеродных наноструктурах – с применением методов рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS), электронной микроскопии и машинного обучения. **Практическая значимость** работы заключается в разработке научных основ для создания высокоэффективных и стабильных электрокатализаторов для низкотемпературных топливных элементов, а также функциональных углеродных материалов с заданными свойствами, что соответствует стратегическим направлениям развития современной энергетики и электроники. **Научная новизна** исследования является многогранной и заключается в первом детальном определении трансформации локальной атомной структуры наночастиц PtCu архитектуры «ядро-оболочка» в сплав в процессе термической обработки, в разработке и успешной апробации новой методики классификации архитектуры биметаллических наночастиц на основе машинного обучения, примененного к парным радиальным функциям распределения, извлеченным из EXAFS-данных, а также в комбинированном анализе методами XPS и XANES для описания локального окружения атомов азота в углеродной матрице, позволившем идентифицировать вклады пиридинового, пиррольного и четырехкоординированного азота и установить корреляцию между условиями синтеза и преобладающим типом азотных центров. **Достоверность полученных результатов** и обоснованность выводов обеспечивается комплексным использованием взаимодополняющих экспериментальных методик, корректным применением стандартизированных программных пакетов для обработки спектроскопических данных (IFEFFIT, Athena), привлечением теоретического моделирования и строгим статистическим анализом, включая машинное обучение, при этом все ключевые выводы демонстрируют хорошую воспроизводимость и согласуются с фундаментальными физическими принципами, что подтверждается также публикацией результатов в высокорейтинговых рецензируемых научных журналах.

Вместе с тем, для полноты научной оценки следует отметить некоторые аспекты, которые могли бы усилить представленную работу. В частности, учитывая сложность и

неоднородность исследуемых систем, было бы методически ценно представить более детальный анализ погрешностей, возникающих при переходе от экспериментальных данных EXAFS к парным радиальным функциям распределения, а также оценить чувствительность алгоритмов машинного обучения к вариациям параметров моделирования, что особенно важно для обеспечения однозначности классификации архитектур наночастиц. Также в автореферате присутствуют отдельные технические неточности, такие как вариативное написание то sp^2/sp^3 , то наоборот, что немного затрудняет анализ полученных результатов.

Указанные замечания носят характер пожеланий по дальнейшему развитию методик и усилению аргументации и ни в коей мере не снижают высокой научной ценности, завершенности и достоверности представленного исследования.

Основные научные положения и выводы обоснованы, достоверны, имеют научную и практическую значимость. В публикациях с достаточной полнотой отражены основные результаты диссертационной работы. Автореферат корректно отражает содержание диссертации. Из автореферата можно заключить, что диссертация «Атомное строение наночастиц PtCu в электрокатализаторах PtCu/C и магнитных центров азота в углеродных наноструктурах» является завершенной научно-квалификационной работой, которая выполнена на высоком научном уровне и соответствует требованиям, предусмотренным пунктами 2.1 - 2.4, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук действующего «Положения о присуждении учёных степеней в ФГАОУ ВО "Южный федеральный университет", утверждённого Приказом № 66-ОД от 29.03.2025, а её автор - Толчина Дарья Борисовна - заслуживает присуждения ей искомой учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

«01» сентября 2025 года



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет» ФГБОУ ВО «ВГУ»	
Подпись	<i>Турищев С. Ю.</i>
заверяю	начальник отдела кадров Должность: <i>Т.В. Зарудняя</i> 20 25
подпись, расшифровка подписи	

Согласен на обработку моих персональных данных

Турищев Сергей Юрьевич
доктор физико-математических наук
по спец. 01.04.10 – физика полупроводников
Воронежский государственный университет

(Адрес: 394018, Россия, г. Воронеж,
Университетская площадь, 1, тел. +7(473)2406653
e-mail: tsu@phys.vsu.ru)