

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Голчиной 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»

Актуальность работы обусловлена необходимостью разработки эффективных и экономичных катализаторов для топливных элементов и создания углеродных материалов с управляемыми магнитными свойствами. Исследование атомной структуры биметаллических наночастиц PtCu и азот-допированных углеродных наноструктур методами рентгеновской спектроскопии представляет значительный научный и практический интерес в контексте развития водородной энергетики и новых электронных устройств.

Научная новизна работы заключается в разработке комплексного подхода к анализу атомной структуры наноразмерных систем, сочетающего современные методы спектроскопии (EXAFS, XANES, XPS), компьютерного моделирования и алгоритмов машинного обучения/классификации. Данный подход позволил впервые:

- проследить переход структуры наночастиц PtCu в результате термической обработки от типа «ядро-оболочка» до типа «твёрдый раствор»;
- разработать метод классификации «архитектур» наночастиц на основе анализа парных радиальных функций распределения атомов;
- установить количественные соотношения между условиями синтеза и типом азотных центров в углеродных материалах;
- определить структурные параметры конфигураций азота и их вклад в магнитные свойства углеродных материалов.

Практическая значимость исследования заключается в установлении связей между условиями синтеза, атомной структурой и функциональными свойствами биметаллических наночастиц PtCu и азот-допированных углеродных материалов, что открывает возможности для направленного дизайна материалов с заданными характеристиками.

Достоверность результатов обеспечивается применением взаимодополняющих экспериментальных методов (EXAFS, XANES, XPS, XRD), использованием стандартизированных процедур обработки данных и хорошим согласованием результатов,

полученных различными методами, что свидетельствует о высокой квалификации автора и глубине проработки исследовательских задач.

Основные выводы работы демонстрируют возможность управления структурой и свойствами наноматериалов через условия синтеза и термической обработки. Полученные результаты вносят существенный вклад в физику конденсированного состояния и представляют ценность для разработки новых функциональных материалов.

Работа является комплексной и соответствует современным тенденциям в области физики наноматериалов. Тем не менее, необходимо указать на ряд методологических и содержательных аспектов, которые могут быть расценены как недостатки или требуют дополнительного разъяснения.

1) В разделе 3 (стр. 15, таблица 2) представлены результаты классификации архитектуры наночастиц с использованием нескольких алгоритмов машинного обучения (k-ближайших соседей, опорных векторов и др.). Однако прогнозы разных методов для одних и тех же образцов существенно различаются (например, для образца PtCu_стадия3 предсказания варьируются от Cu@Pt до структуры сплава). Автор выбирает метод k-ближайших соседей как наиболее соответствующий ожиданиям, но не предоставляет строгих статистических обоснований этого выбора (например, значений precision, recall для каждого классификатора на тестовой выборке). Это вносит элемент субъективности и ставит под вопрос надёжность окончательных выводов о структуре наночастиц, полученных данным методом.

2) В разделе 4 для количественного анализа спектров N K-XANES использовалась линейная комбинация теоретических спектров, рассчитанных для модельных кластеров. Энергетические сдвиги между этими компонентами (ϵ_i) подбирались в процессе фитинга и затем сверялись с данными РФЭС. Такой подход является интуитивно понятным, но его валидность требует демонстрации того, что энергетическое выравнивание теоретических спектров проведено корректно и систематически. Недостаточно подробное описание процедуры выравнивания (например, какой спектр или уровень энергии использовался в качестве эталонного) может привести к неоднозначности интерпретации и сделать процесс фитинга в некоторой степени произвольным.

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы, ее научной значимости, и не влияют на её основные результаты и выводы.

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 завершённой 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.

«29» августа 2025 года

Согласен на обработку моих персональных данных



Кирпиченков Валерий Яковлевич,
доктор физико-математических наук
(01.04.07 – физика конденсированного состояния),
профессор, профессор кафедры «Физика и фотоника»
Институт фундаментального инженерного образования

Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени
М.И. Платова

(Адрес: 346428, г. Новочеркасск, Ростовская обл., ул. Просвещения, д. 132, тел. (8635) 255481
e-mail: wkirpich@rambler.ru)

Подпись Кирпиченкова В.Я. заверяю
Ученый секретарь ЮРГПУ (НПИ)



Н.Н. Холодкова

21.09.2025