

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ЮФУ801.01.06,
созданного на базе Научно-исследовательского института физики ЮФУ,
по диссертации на соискание учёной степени **кандидата наук**

аттестационное дело № _____,
решение диссертационного совета от 10.09.2025 № 60

О присуждении **Толчиной** Дарье Борисовне, гражданке РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Атомное строение наночастиц PtCu в электрокатализаторах PtCu/C и магнитных центров азота в углеродных наноструктурах»** по специальности **1.3.8. Физика конденсированного состояния**, принятая к защите 08.07.2025 (протокол заседания № **49**) диссертационным советом ЮФУ801.01.06, созданным на базе НИИ физики ЮФУ, приказ № 236-ОД от 20.09.2024.

Соискатель Толчина Дарья Борисовна, 1995 года рождения, в 2019 году окончила магистратуру физического факультета Южного федерального университета по направлению «Физика». В период с 01.10.2019 по 22.09.2023 была аспирантом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» по направлению 03.06.01 – Физика и астрономия, по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической и вычислительной физики физического факультета ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель: **Авакян** Леон Александрович, профессор кафедры теоретической и вычислительной физики физического факультета Южного федерального университета, доктор физико-математических наук.

Официальные оппоненты: **Лагутин** Борис Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Ростовский государственный университет путей сообщения» (Ростов-на-Дону), профессор кафедры «Физика», и **Кардаш** Татьяна Юрьевна, кандидат химических наук, Институт катализа имени

Г. К. Борескова СО РАН (Новосибирск), старший научный сотрудник отдела исследования катализаторов, дали положительные отзывы.

Соискатель имеет 19 опубликованных работ по теме диссертации (общим объёмом 5,7 п. л. в соавторстве, из которых соискателю принадлежит 1,75 п. л.), из них 10 статей в российских и международных журналах, входящих в базы данных Scopus и/или Web of Science, и в изданиях, входящих в Перечень научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёных степеней, остальные публикации - статьи и тезисы в трудах конференций различного уровня.

Наиболее значимые публикации соискателя:

1. Graphene clusters in carbon: Structural features and magnetic properties / H. Gyulasaryan, **D. B. Tolchina**, L. A. Avakyan [et al.] // Applied Surface Science. – 2025. – Vol. 687 – Art. No 162284 (12 p.).
2. Атомное и электронное строение допированных азотом кластеров нанографена по данным комбинированного анализа методами XPS и XANES / **Д. Б. Толчина**, Л. А. Авакян, В. В. Срабионян [и др.] // Физика твёрдого тела. – 2024. – Т. 66, № 3. – С. 452–459.
3. Ultimate sensitivity of radial distribution functions to architecture of PtCu bimetallic nanoparticles / L. A. Avakyan, **D. B. Tolchina**, V. V. Barkovski [et al.] // Computational Materials Science. – 2022. – Vol. 208 – Art. No 111326 (12 p.).
4. Effect of Thermal Treatment on the Atomic Structure and Electrochemical Characteristics of Bimetallic PtCu Core–Shell Nanoparticles in PtCu/C Electrocatalysts / V. V. Pryadchenko, S. V. Belenov, **D. B. Shemet** (Толчина) [et al.] // The Journal of Physical Chemistry C. – 2018. – Vol. 122, No. 30. – P. 17199–17210.
5. Влияние термообработки на атомную структуру core–shell наночастиц PtCu в составе электрокатализаторов PtCu/C / В. В. Прядченко, С. В. Беленов, **Д. Б. Шемет** (Толчина) [и др.] // Физика твёрдого тела. – 2017. – Т. 59, № 8. – С. 1642–1649.

На автореферат диссертации поступило 4 положительных отзыва с замечаниями и вопросами: от **Турищева** Сергея Юрьевича с пожеланием «...более детального анализа погрешностей, возникающих при переходе от экспериментальных данных EXAFS к парным радиальным функциям распределения, а также оценить чувствительность алгоритмов машинного обучения к вариациям параметров моделирования...» (ВГУ, Воронеж); от **Бакиевой** Ольги Ринатовны с вопросами: «...возможно ли модифицировать метод..., чтобы исключить эти вычисления парных радиальных функций распределения атомов и перейти прямо к анализу экспериментальных EXAFS спектров без математической обработки? Может ли использование диапазона XANES упростить этот процесс?»; «...или эффективнее будет метод без учителя?» (ФТИ УФИЦ УО РАН, Ижевск); от **Кирпиченкова** Валерия Яковлевича с замечанием: «...Автор выбирает метод k-ближайших соседей..., но не предоставляет строгих статистических обоснований этого выбора...»;

«...использовалась линейная комбинация теоретических спектров для модельных кластеров...», «...энергетические сдвиги сверялись с данными РФЭС...», что «...может привести к неоднозначности интерпретации и сделать процесс фитинга в некоторой степени произвольным.» (ЮРГПУ (НПИ) имени М. И. Платова, Новочеркасск); и от **Жачука** Руслана Анатольевича с вопросами: 1) «Как выбирались параметры расчёта?» и 2) «Рассматривалось ли использование более точных, гибридных функционалов?» (ФГБУН ИФП имени А. А. Ржанова СО РАН, Красноярск).

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что **Лагутин Б. М.** является известным специалистом в области теоретической физики конденсированного состояния и в исследовании электронной структуры сложных атомных систем современными спектроскопическими методами, а **Кардаш Т. Ю.** является специалистом в теоретической химии и физике конденсированного состояния и по исследованию многокомпонентных катализаторов.

Диссертационный совет отмечает, что в результате проведённых соискателем теоретических исследований был использован комплексный подход для определения атомного строения биметаллических наночастиц PtCu в электрокатализаторах и магнитных центров азота в углеродных наноструктурах, включающий методы рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS: EXAFS и XANES), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), рентгеновской дифракции (XRD), а также методы компьютерного моделирования и машинного обучения. При этом проводился количественный анализ экспериментальных спектров, построены атомные модели наночастиц и углеродных кластеров, рассчитаны их теоретические спектры и сравнены с экспериментальными, что позволило выявить новые структурные особенности наноматериалов и установлена взаимосвязь между их строением и функциональными свойствами. Определено атомное строение биметаллических наночастиц PtCu со структурой «ядро-оболочка», синтезированных методом последовательного восстановления, и установлена эволюция их структуры при термической обработке: размытие границы ядро-

оболочка при 523 К, разрушение этой архитектуры и формирование твёрдого раствора при (553–573) К, агрегация и упорядочение сплава при 623 К. *Выявлено*, что метод машинного обучения (к-ближайших соседей), применённый к парным радиальным функциям распределения атомов, избирательно чувствителен к архитектуре наночастиц (ядро-оболочка, градиент или сплав) и позволяет надёжно идентифицировать её по экспериментальным данным EXAFS. *Установлено* влияние давления на структуру азот-допированных углеродных материалов: увеличение давления приводит к уменьшению отношения Pyridinic-N/Pyrolic-N и увеличению доли sp^3 -гибридизации углерода. *Доказано*, что особенности в околопороговой области (NK-XANES) спектров поглощения азота обусловлены вкладами специфических атомных конфигураций: пик А (~398.5 эВ) – вкладом трёхатомной конфигурации C-N-C пиридинового типа, пик В (~399.8 эВ) – вкладом конфигурации C-N-C пиррольного типа, а особенности в области 399–402 эВ (пики С и D) – вкладом четырёхатомной конфигурации O=N-2C. *Предложена и апробирована* методика количественного анализа спектров NK-XANES на основе прямого расчёта спектров для модельных кластеров, позволившая определить параметры межатомных связей и количественное соотношение различных типов азотных центров.

Теоретическая значимость исследования: впервые показано, что термическая обработка катализаторов PtCu/C приводит к фазовому переходу от структуры «ядро-оболочка» к твёрдому раствору, что сопровождается увеличением координационных чисел и появлением сверхструктурных рефлексов на дифрактограммах; *установлена* высокая чувствительность парных радиальных функций распределения атомов, полученных из EXAFS, к архитектуре биметаллических наночастиц, что открывает новые возможности для диагностики их структуры методами машинного обучения; *доказано*, что первые спектральные особенности в NK-XANES спектрах N-допированного углерода определяются вкладами локальных трёхатомных конфигураций C-N-C с чётко различающимися геометрическими параметрами для пиридинового и пиррольного азота, а не только

типом гибридизации; *разработана* и верифицирована методика комбинированного анализа данных $N1s$ -XPS и NK -XANES для однозначного определения локальной атомной структуры и количественного соотношения различных состояний азота в углеродных материалах.

Значение полученных соискателем результатов для практики определяется разработкой научных основ для создания высокостабильных и эффективных электрокатализаторов на основе PtCu/C для низкотемпературных топливных элементов; *оптимизацией* синтеза азот-допированных углеродных носителей с заданной структурой и свойствами для применения в спинтронике; созданием новых методических подходов (машинное обучение для анализа ПРФРА, комбинированный анализ XPS/XANES) для точной диагностики структуры сложных многокомпонентных наноматериалов, что позволит ускорить и снизить стоимость их разработки.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что использованный методический аппарат, основанный на применении признанных программных комплексов для обработки спектроскопических данных, обеспечивает высокую надёжность получаемых результатов. Экспериментальные данные демонстрируют хорошую воспроизводимость, а *применяемые* методы анализа и теоретического моделирования полностью соответствуют установленным физическим концепциям. Достоверность разработанных методик подтверждена их валидацией на тестовых системах и материалах с заранее известной структурой. Полученные результаты и выводы работы нашли своё полное отражение в публикациях в авторитетных рецензируемых отечественных и зарубежных научных изданиях.

Личный вклад соискателя состоит в том, что она лично провела анализ экспериментальных данных XAFS, моделирование теоретических и экспериментальных спектров (XANES, EXAFS), участвовала в синтезе наночастиц PtCu, в разработке и тестировании программного кода на Python для анализа спектров и применения машинного обучения к ПРФРА. Определение направления

исследований, постановка цели и задач, формулирование научных положений, обсуждение результатов и выводов, подготовка публикаций проводились соискателем совместно с научным руководителем и соавторами совместных публикаций.

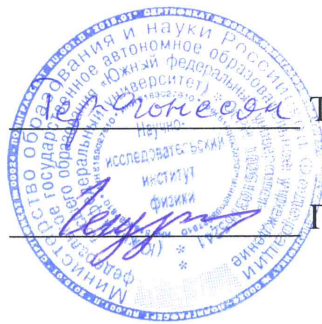
На заседании 10.09.2025 диссертационный совет отметил, что рассматриваемая диссертация соответствует критериям раздела 2 «Положения о присуждении учёных степеней в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южный федеральный университет», и принял решение присудить **Толчиной Д. Б.** учёную степень **кандидата** физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из которых 7 докторов наук по научной специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета (дополнительных членов не вводилось), проголосовали: за – 15, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель
диссертационного совета

Учёный секретарь
диссертационного совета

18.09.2025



Тер-Оганесян Никита Валерьевич

Гегузина Галина Александровна