

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Толчиной Дарьи Борисовны на тему «Атомное строение наночастиц PtCu в электрокатализаторах PtCu/C и магнитных центров азота в углеродных наноструктурах» представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Толчиной Д.Б. посвящена разработке научных основ синтеза высокоэффективных материалов для топливных ячеек. Данное направление актуально и входит в число приоритетных направлений научно-технологического развития Российской Федерации. В работе проведено исследование структурных характеристик биметаллических наноразмерных частиц PtCu полученных в процессе многоступенчатого осаждения на углеродный носитель, а также азотных центров в углеродной матрице, сформировавшихся в результате твердофазного пиролиза с вариацией давления. Благородные металлы, такие как платина, давно и успешно применяются в процессах гетерогенного катализа, однако остается актуальной задача снижения производственных затрат. Объекты исследования данной диссертационной работы, помимо экономической выгоды, обеспечивают высокую каталитическую активность, повышение эффективности, стабильности и долговечности катализаторов. Поставленная цель и задачи диссертационного исследования Толчиной Д.Б., обоснованы и актуальны. В диссертации справедливо отмечается главенствующая роль локального атомного строения в формировании заданных функциональных свойств материалов. Проведено исследование структурных характеристик биметаллических наноразмерных частиц и азотных центров, приведены убедительные аргументы в пользу выбранных методов анализа. Приведено подробное описание процедуры обработки экспериментальных данных и получения количественных результатов.

Известно, что межфазная граница в биметаллических системах является зоной активного взаимодействия, влияющей на стабильность системы и протекание каталитических процессов. Особое внимание Толчина Д.Б. уделяет определению архитектуры частиц типа «ядро-оболочка» с использованием комплекса методов математического моделирования и сравнительным анализом полученных результатов. Важным достоинством диссертации является использование методов машинного обучения, в частности обучение с учителем, основанное на использовании парных радиальных функций распределения атомов рассчитанных теоретически. Автором рассмотрены более десятка методов классификации различной сложности, среди которых наиболее чувствительным к архитектуре наночастиц PtCu оказался метод классификации k -ближайших соседей. Этот вывод поднимает следующий вопрос: возможно ли

модифицировать метод таким образом, чтобы исключить этап вычисления парных радиальных функций распределения атомов и перейти прямо к анализу экспериментальных EXAFS спектров без математической обработки? Может ли использование диапазона XANES сигнала упростить этот процесс? Или для такого анализа эффективнее будет метод без учителя?

Полученные Толчиной Д.Б. результаты открывают путь к созданию новых высокоэффективных катализаторов с пониженным содержанием платины, а результаты исследования азотсодержащих углеродных материалов потенциально расширят область применения, включая разработку мембранных материалов, топливных элементов, аккумуляторов и суперконденсаторов.

Отмеченные замечания не снижают ценности выполненных исследований и не влияют на положительную оценку полученных результатов. Автореферат диссертации «Атомное строение наночастиц PtCu в электрокатализаторах PtCu/C и магнитных центров азота в углеродных наноструктурах» представляет собой завершенное научное исследование, представленные результаты, уровень и количество научных публикаций, докладов на конференциях соответствуют требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата наук, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Толчина Д.Б., заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Бакиева Ольга Ринатовна
кандидат физико-математических наук,
01.04.07 «Физика конденсированного состояния»
с.н.с. лаборатории атомной структуры и анализа поверхности
Отдела физики и химии поверхности
Физико-технического института
Удмуртского Федерального Исследовательского Центра
Уральского Отделения РАН
Тел.: +79770491180
e-mail: bakieva@udman.ru
адрес: 426000, г. Ижевск, ул. Кирова, д.132

Согласна на обработку персональных данных
29 августа 2025 г.

 Бакиева О.Р.

ПОДПИСЬ



УДОСЛОВЕРЯЮ



Главный специалист

ОТДЕЛА КАДРОВ

Л. П. ДЕРЖАВ

