

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»

В диссертационной работе Толчиной (Шемет) Д. Б. представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований, посвященных **актуальной проблеме** структурной диагностики сложных многокомпонентных систем – биметаллических наночастиц PtCu в углеродной матрице и допированной азотом углеродных наноструктур. Актуальность выбранных объектов обосновывается областью их применения — наночастицы на углеродном носителе разрабатываются в качестве более дешёвых и более стойких электрохимических катализаторов реакции восстановления кислорода в водородных двигателях, а сама по себе углеродная матрица, будучи допированной азотом, приобретает необычные магнитные свойства. Исследование выполнено методами рентгеновской спектроскопии поглощения (XAFS), электронной микроскопии, моделирования на основе теории функционала плотности с привлечением методов машинного обучения. **Научная новизна** исследования заключается в том, что впервые детально определена трансформация локальной атомной структуры наночастиц PtCu от архитектуры «ядро-оболочка» до архитектуры типа сплава в результате термической обработки. Также впервые предложена методика идентификации архитектуры биметаллических наночастиц на основе методов классификации с использованием машинного обучения. Диссертационная работа выделяется проведенным комбинированным анализом методами XPS и XANES для описания локального окружения атомов азота в углеродной матрице. Это позволило 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 результаты демонстрируют хорошую воспроизводимость, а выводы

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, недостаточное внимание уделено выполненным расчетам на основе теории функционала плотности. Как выбирались параметры расчета? Для вычислений использовался функционал PBE, в то время как известны ограничения его применимости. Рассматривалось ли использование более точных, гибридных функционалов?

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».

«28» августа 2025 года



Согласен на обработку моих персональных данных

Жачук Руслан Анатольевич,

доктор физико-математических наук

по специальности 1.3.8 — физика конденсированного состояния,

без звания, старший научный сотрудник лаборатории нанодиагностики и нанолитографии

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук

(Адрес: 630090, г. Новосибирск, пр-т ак. Лаврентьева 13, тел: +7(383)330-90-55,

e-mail: ifp@isp.nsc.ru, www.isp.nsc.ru)

Подпись

д.ф.м.н.



А. уральский

Ученый секретарь
ИФП СО РАН
С.А. Аржанникова