

## Рецензия на работу Ковалева Е. В., Матвеева А. В.

### «Развитие метода Монте-Карло для моделирования критических явлений в реакции окисления СО на платине и палладии: от монокристаллов к реальным нанесенным системам»

Работа состояла из двух взаимосвязанных частей. В первую очередь авторы предполагали провести увеличение размера исследуемых систем на основе монокристаллов методом Монте-Карло, что позволило бы выяснить причины самоорганизации химической реакции на макроуровне. Так как расчеты подобных объектов потребуют значительного количества машинного времени, то предполагалось использование возможностей Института вычислительной математики и математической геофизики. Объявленные цели проекта.

Вторая часть связана с исследованием нанесенных частиц и построением модели, способной рассчитывать кинетику протекания реакции окисления СО на поверхности нанесенных частиц палладия и платины с учетом различных свойств граней частиц.

При выполнении работы авторы так и не смогли значительно увеличить размер исследуемых систем по принципиальным причинам – распараллеливание процессов при используемом алгоритме расчетов не дало существенной производительности процесса расчета. Диффузии мы столкнулись с «проблемой асинхронного клеточного автомата». Тем не менее были выполнены расчеты на монокристалле палладия размером  $8000 \times 8000$  атомов. В результате обнаружен принципиально новый тип пространственно-временных образований на поверхности типа «кольцо в кольце», наблюдавшийся ранее в эксперименте. Принципиальный вывод проведенных расчетов заключается в том, что увеличение размера моделируемой решетки не приводит к «рассинхронизации» автоколебаний – автоколебательный режим сохраняется, однако при этом наблюдается уменьшение амплитуды колебаний.

Для исследования процессов на нанесенных частицах была построена модель, написана программа, и проведены расчеты по изучению условий существования автоколебательного режима с использованием метода Монте-Карло. Определено влияние: (i) разной каталитической активности различных граней наночастицы, что вносит вклад в суммарную активность частицы сложным нелинейным образом; (ii) диффузии адсорбированных веществ по поверхности носителя к частице и наоборот (спилловер); проведены расчеты по изучению процесса изменения морфологии частицы под воздействием реагентов, т.е. «подстраивания» частицы под режим автоколебаний.

В целом результаты проведенных исследований представляют значительный научный интерес, и как показано в отчете, прошли серьезную апробацию на международных конференциях. Не смотря на то, что авторы оценивают степень выполнения заявленных в проекте задач на 80 %, можно считать, что основная часть работ была успешно выполнена и отчет должен быть рекомендован к окончательному финансированию.