

Рецензия на отчет по работе Ковалева Е. В. и 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»**

После ознакомления с окончательным отчетом можно сделать вывод, что авторам удалось значительно продвинуться в вопросе исследования возникновения автоколебаний и других критических явлений, возникающих при окислении СО на поверхности модельных систем, монокристаллов и мелкодисперсных нанесенных частиц.

Отрадно видеть, что более половины представленных результатов авторы получили уже во второй части выполнения проекта после того, как им удалось значительно улучшить возможности расчетной программы OSCILLATIONS для применения расчетов частиц, состоящих из различных граней либо частиц, нанесенных на подложку. При этом стало возможно задавать различные наборы констант элементарных стадий реакции для различных граней и/или подложки.

Не являясь специалистом в этой теме, могу тем не менее подтвердить, что неоднородные структуры, полученные авторами на частицах палладия размером  $1000 \times 1000$  атомов уже сильно похожи на реально наблюдаемые в эксперименте и описанные в литературе.

В отчете присутствуют ряд неясностей, которые авторам следовало бы разъяснить:

1. Авторы пишут, что им не удалось реализовать расчеты на модельных системах большого размера (более  $10^4 \times 10^4$  атомов), при этом остается неясно, насколько это необходимо. Какие дополнительные явления или особенности протекания процесса смогли бы они выяснить в этом случае?
2. Термин «пространственно-временная неоднородная структура» слишком расплывчатый и авторам следовало бы его определить четче. Тем более, что в их случае можно было подобрать простые слова, наглядно характеризующие результаты расчетов и графическое представление.
3. Из отчета осталось неясным, удалось ли авторам промоделировав режим автоколебаний получить параметры, близкие к реальным системам? Или быть может, предсказать какой должна быть такая система и как ее приготовить (в физическом смысле)? Насколько полученные значения физических констант скорости и адсорбции отдельных стадий соответствуют реальным значениям, наблюдаемым на практике.

В общем, несмотря на то, что работа выглядит слегка отстраненной от практических экспериментов можно заключить, что авторы справились с поставленными задачами.

к.х.н., с.н.с.

/Д. В. Козлов/