

## Комментарий к работе “Исследование взаимодействия палладиевого наноконтакта с молекулой водорода” (Письма в ЖЭТФ 93(9), 588 (2011))

О. В. Степанюк

Физический факультет МГУ им. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 июня 2012 г.

После переработки 13 июня 2012 г.

В работе “Исследование взаимодействия палладиевого наноконтакта с молекулой водорода” авторы ставят ряд актуальных вопросов о влиянии примесей на атомную структуру и механические свойства палладиевого наноконтакта.

Однако по ходу прочтения работы возникает ряд вопросов, прежде всего к представленной методике исследований. В частности:

1) в своей работе авторы пишут: “...Для моделирования процесса формирования металлических наноконтактов был использован метод молекулярной статистики с многочастичными потенциалами [13]...”. Далее приводится потенциал в использованной авторами форме. Следует заметить, что форма части потенциала для отталкивающего взаимодействия из работы [13] (W. Zhong, Y. Cai, and D. Tománek, *Mechanical stability of Pd-H systems: A molecular-dynamics study*, Phys. Rev. B **46**, 8099 (1992)) отличается от формы, опубликованной авторами. В результате неясно, каким образом авторы использовали в своей работе параметры потенциалов из цитируемой ими работы [13]. Если форма потенциала изменялась вследствие некоторых математических преобразований, то обсуждение этого вопроса (равно как

и применимости параметров из работы [13], а также влияния подобных преобразований на точность воспроизведения исследуемого физического явления) в работе, к сожалению, отсутствует;

2) из качественных соображений можно предположить, что в случае одномерных наноконтактов энергия связи будет больше, чем для тех же атомов в конфигурации на поверхности. (Хотя использование данного подхода и для расчета поверхностных конфигураций может в ряде случаев вызывать вопросы; см., например, Phys. Rev. B **61**, 2203 (2000)). Однако авторы не приводят никаких результатов расчетов из первых принципов, способных подтвердить корректность использованных параметров потенциала для расчетов свойств поверхностных конфигураций и одномерного наноконтакта.

3) так называемый Tight-Binding подход, взятый авторами на вооружение, разрабатывался и исторически применялся в основном для расчетов свойств металлических наноструктур на базе решеток типа ГЦК. Авторы работы не приводят результатов тестовых расчетов, которые подтверждали бы корректность описания связей типа Н–Н с использованием представленного подхода.