

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

А. Л. Клавсюк¹⁾, С. В. Колесников, И. К. Гайнуллин, А. М. Салецкий

МГУ им. Ломоносова, 119991 Москва, Россия

Поступила в редакцию 25 июня 2012 г.

Действительно, в нашей работе [1] и работе [2] формы потенциалов отличаются одним слагаемым. В нашей программе используются потенциалы в виде, в котором они приведены в статье. При $A_{\alpha\beta}^1 = 0$ они сводятся к виду, представленному в работе [2]. В других наших работах с использованием данных потенциалов подобных неточностей не встречается [3]. Стоит отметить, что подобные опечатки (или неточности) встречаются и в других работах. Например в работе О.В. Степанюка и др. [4] используются потенциалы с $A_{\alpha\beta}^1$, а ссылка дана на вид потенциалов без $A_{\alpha\beta}^1$. На наш взгляд, подобные неточности не влияют на понимание метода расчета.

К сожалению, мы не нашли работы Phys. Rev. B **61**, 2203 (на сайте rpb.aps.org ее нет). Поэтому мы не можем ничего возразить. Формат журнала “Письма в ЖЭТФ” не позволяет в полном объеме представить расчеты, подтверждающие корректность использованных параметров потенциала. Тем не менее на научных семинарах к.ф.-м.н. Д.И. Бажанов представлял результаты расчетов с использованием данных потенциалов свойств поверхностных конфигураций и сравнивал их с результатами расчетов из первых принципов. Более подробно эти результаты изложены в дипломной работе И.А. Супрядкиной [5] под рук. к.ф.-м.н. Д.И. Бажанова и, частично, в нашей работе [3].

Результаты, полученные с использованием данного вида потенциалов для описания свойств металлических наноструктур, хорошо согласуются как с экс-

периментом [6], так и с расчетами из первых принципов [7]. Выше мы дали исчерпывающий ответ на вопрос о том, насколько хорошо они описывают систему Pd–H. Отметим только, что работа [1] посвящена не взаимодействию атомов водорода, а взаимодействию атомов палладия с водородом. Определяющим в наших исследованиях является именно взаимодействие атомов палладия с водородом, которое, на наш взгляд и взгляд независимых экспертов (см. второй абзац), хорошо описывается используемыми в статье [1] потенциалами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты # 10-02-01274-а, 11-02-12256-офи-м-2011).

1. А. Л. Клавсюк, С. В. Колесников, И. К. Гайнуллин, А. М. Салецкий, Письма в ЖЭТФ **93**, 588 (2011).
2. W. Zhong, Y. Cai, and D. Tomanek, Phys. Rev. B **46**, 8099 (1992).
3. S. V. Kolesnikov, A. L. Klavsyuk, and A. M. Saletsky, ЖЭТФ **114**, 1137 (2012).
4. O. V. Stepanyuk, N. N. Negulyaev, A. M. Saletsky et al., Phys. Rev. B **78**, 113406 (2008).
5. И. А. Супрядкина, *Исследование образования вакансионных и водород-вакансионных комплексов в палладии и его гидриде методами молекулярной динамики*, М.: 2010.
6. H. L. Meyerheim, V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk et al., Phys. Rev. B **72**, 113403 (2005).
7. V. S. Stepanyuk, A. L. Klavsyuk, L. Niebergall et al., Phase Transitions **78**, 61 (2005).

¹⁾ e-mail: klavsyuk@physics.msu.ru