

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Оганова Артема Ромаевича на диссертацию Штарева Дмитрия Сергеевича на тему «Фотостимулированные процессы в объеме и на поверхности висмутатов щелочноземельных металлов в гетерогенных системах», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Солнечная энергия используется человечеством лишь в небольшой степени – это касается как солнечных батарей, так и, в еще большей степени, фотоиндуцированных химических процессов. В частности, фотокаталитическое расщепление воды (для производства водорода и кислорода) и органических молекул (для очистки от них) имеют огромный технологический потенциал. Самое большое препятствие для масштабного применения этих технологий – низкая эффективность известных материалов. Поэтому очень важно найти новые материалы, и тут перспективными являются, среди прочих классов соединений, висмутаты. Но этот класс соединений не очень хорошо изучен. В данной диссертации разработаны методики синтеза висмутатов, изучены их кристаллические структуры и зонная структура, механизмы фотокаталитических процессов. Обнаружены закономерности зонной структуры висмутатов щелочноземельных металлов, используя которые можно подобрать оптимальный материал для того или иного применения.

Работа хорошая, но по тексту диссертации у меня есть несколько вопросов и комментариев:

1. В русской литературе принят термин «ромбический», а не «орторомбический».
2. Рис.40 – что можно увидеть из сравнения типов решеток Браве модификаций CaBi<sub>6</sub>O<sub>10</sub>? Решетка Браве это всего лишь набор трансляционных векторов, ничего не говорящий о положениях атомов. Гораздо лучше привести кристаллические структуры.
3. Рис.59 – даны графики пространственных групп висмутатов стронция. А почему не дать кристаллические структуры? Это гораздо информативнее.
4. На стр. 204 странное предложение:  
«Следует отметить, что эти две ячейки (I2/m и C2/m) не могут быть преобразованы друг в друга, поскольку C2/m имеет в два раза меньший объем. Меньший объем элементарной ячейки C2/m является большим преимуществом, поскольку количество уточняемых параметров будет намного меньше.»  
Дело в том, что удвоенная ячейка имеет все то же число степеней.
5. Таблица 29 – в структуре BaBi<sub>2</sub>O<sub>4</sub> у всех позиций заселенность около 0.5? В это крайне сложно поверить, я думаю, что тут опечатки.

6. Расчеты зонной структуры недостаточно описаны. В частности, какой функционал плотности использовался? Обычные приближения LDA и GGA занижают ширину запрещенной зоны значительно, примерно на 30-40%. Наблюдалось ли такое занижение в данной работе? Или же использовались другие функционалы, более точные для зонной структуры? Если да, то какие?

Все эти замечания носят частный, второстепенный характер и ни в коем случае не уменьшают важности и достоинств диссертации. Диссертация Штарева Дмитрия Сергеевича на тему: «Фотостимулированные процессы в объеме и на поверхности висмутатов щелочноземельных металлов в гетерогенных системах» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Штарев Дмитрий Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Член диссертационного совета



Артем Ромаевич Оганов

Доктор физико-математических наук по специальности «кристаллография и минералогия».

Профессор Сколковского Института Науки и Технологий

Профессор РАН

19 апреля 2022 г.

Prof. Artem R. Oganov MAE FRSC

Member of Academia Europaea; Fellow of the Royal Society of Chemistry; Fellow of the American Physical Society; Fellow of the Mineralogical Society of America