

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сабирова Дениса Шамилевича «Теоретическое исследование поляризуемости фуллеренов и их производных», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук (специальность 02.00.04 – физическая химия).

Диссертационная работа Д.Ш. Сабирова посвящена теоретическим расчетам поляризуемости молекулярных соединений на основе фуллеренов. В диссертации были выполнены теоретические исследования структуры и поляризуемости ряда фуллеренов и их производных. Кроме того, был выполнен анализ взаимосвязей структурных параметров и свойств изученных соединений, в результате чего был найден ряд зависимостей поляризуемости от структурных характеристик молекул.

Для расчета геометрически оптимизированной структуры молекул и их поляризуемости автором использовался метод теории функционала плотности (с использованием функционалов для расчета обменно-корреляционной энергии PBE и B3LYP). К наиболее интересным фундаментальным результатам, полученным в работе, относятся найденные зависимости поляризуемости от структурных характеристик, величиной заряда анионов и катионов, а также взаимосвязь между поляризуемостью и реакционной способностью соединений на основе фуллеренов.

Полученные в диссертационной работе результаты являются новыми, прошли достаточную апробацию - опубликованы в 31 статье в рецензируемых отечественных и зарубежных научных журналах, докладывались на международных и всероссийских конференциях.

В качестве замечания по диссертации следует указать отсутствие в автореферате детального обоснования выбора для расчетов функционалов PBE и B3LYP, в чем их преимущество по сравнению, например, с функционалами PW, X3LYP, B3PW91 или M11? Выполнялся ли сравнительный анализ результатов полученных функционалами PBE и B3LYP, с результатами полученными другими функционалами?

Сделанное замечание не влияет на положительную оценку диссертационной работы.

Диссертационная работа Сабирова Дениса Шамильевича «Теоретическое исследование поляризуемости фуллеренов и их производных» представляет собой научно-квалификационную работу, в которой, на основании выполненных автором исследований, разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области физической химии связанной с исследованием структуры и свойств фуллеренов и их производных. Полученные в диссертации результаты обладают новизной и практической значимостью, опубликованные работы отражают ее основное содержание. Диссертация Д.Ш. Сабирова соответствует требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям «Положением о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Профессор кафедры  
физики конденсированного состояния  
Челябинского государственного университета,  
доктор физико-математических наук, профессор

Е.А. Беленков

454001, Челябинск, ул. Братьев Кашириных 129, ЧелГУ, физический факультет  
Тел.: (351) 799-71-17  
E-mail: belenkov@csu.ru  
[https://www.researchgate.net/profile/E\\_Belenkov](https://www.researchgate.net/profile/E_Belenkov)

Подпись Е.А. Беленкова заверяю

