



ACTINIUM CHEMICAL RESEARCH INSTITUTE

Scientific Director: Dr. Prof. Franco Cataldo

Via Casilina 1626A, 00133 Rome, Italy

Phone: ++39-06-94368230; e-mail : franco.cataldo@fastwebnet.it

Rome, November 28, 2017

To Moscow State University

Review on the Abstract of Doctoral Thesis
'A Theoretical Study on Polarizability of Fullerenes and Their Compounds'
written by Denis Sabirov

I am writing on Denis Sabirov eligibility for the doctoral degree of Moscow State University. The English version of the abstract of Sabirov's thesis provides a sufficient information to evaluate his significant contribution into the studies of polarizable properties of fullerene compounds. Before Sabirov's works, the polarizability has been deeply investigated only for fullerenes and their endohedral complexes. Denis Sabirov extended the polarizability data to fullerene adducts, fullerene oligomers, and fullerene ions. His works are based on the density functional theory calculations and interpretation of the results in terms of the relevant additive schemes. The main advantage of such approach is that the computed values allows formulating general laws / correlations between the structure and the polarizability of the fullerene compounds. These laws, as shown by the author, are nonlinear and he calls the negative nonadditivity as depression and positive nonadditivity as exaltation of polarizability. Depression of polarizability, as Sabirov discovered, is typical for all fullerene adducts with inorganic and organic addends. However, if we use another fullerene moiety as an addend, we obtain the case of the exaltation. This is the main basic result of the graduation thesis.

As for applications, Denis Sabirov recommends (and justifies the recommendation) the polarizability as a key parameter for assessing the screening effects in endofullerenes and energy conversion efficiency of the isomer-free fullerene-adduct organic solar cells. This part of his work relates directly to the experiment and demonstrate high prediction potential for material science.



1

ACTINIUM CHEMICAL RESEARCH S.R.L.
Direttore Scientifico
PROF. FRANCO CATALDO

All the results presented in the Abstract are novel and scientifically important. They are widely presented in the periodicals. According to citations, his work is highly respected in the fullerene scientific community. Thus, I am delighted to consider that Denis Sh. Sabirov meets all requirements to obtain a doctoral degree of Moscow State University in the field of physical chemistry.

Prof. Franco Cataldo

Scientific Director
Actinium Chemical Research Institute
Via Casilina 1626A, Rome, Italy

&

Professor of general chemistry
Tuscia University,
Viterbo, Italy

&

Editor-in-Chief of the journal
Fullerenes Nanotubes & Carbon
Nanostructures
published by Taylor & Francis
USA



ACTINIUM CHEMICAL RESEARCH S.R.L.

Direttore Scientifico

PROF. FRANCO CATALDO

Перевод

Химический исследовательский институт Актиниум
Директор по научной части: доктор, профессор Франко Кательдо
Виа Касилина 1626А, 00133 Рим, Италия
Тел.: ++39-09-94368230, e-mail: franco.cataldo@fastwebnet.it

Рим, 28 ноября 2017 г.

В Московский государственный университет

Отзыв на автореферат докторской диссертации «Теоретическое исследование поляризуемости фуллеренов и их соединений», написанной Денисом Сабировым

Я пишу о приемлемости Дениса Сабирова для получения докторской степени Московского государственного университета. Английская версия автореферата диссертации Сабирова дает достаточно информации, чтобы оценить его вклад в изучение поляризационных свойств фуллереновых соединений. До работ Сабирова поляризуемость была глубоко изучена только для фуллеренов и их эндоэдральных комплексов. Денис Сабиров расширил данные о поляризуемости на фуллереновые аддукты, фуллереновые олигомеры и фуллереновые ионы. Его исследования базируются на методах теории функционала плотности и интерпретации их результатов в терминах релевантных аддитивных схем. Главное преимущество такого подхода заключается в возможности формулирования общих законов и корреляций между структурой и поляризуемостью соединений фуллеренов. Эти законы, как показано автором, нелинейны, и он называет отрицательную неаддитивность депрессией, а положительную — экзальтацией поляризуемости. Как открыто Сабировым, депрессия поляризуемости типична для всех фуллереновых аддуктов с неорганическими и органическими аддендами. Однако в случае если аддендом является другой фуллереновый каркас, мы получаем экзальтацию. Это — самый важный фундаментальный результат диссертационной работы.

Что касается прикладных аспектов, Денис Сабиров рекомендует (и обосновывает рекомендацию) поляризуемость в качестве параметра для оценки экранирования в эндофуллеренах и преобразования энергии в органических солнечных элементах на основе изомерно чистых фуллереновых аддуктов. Эта часть его исследования напрямую относится к эксперименту и демонстрирует высокий предсказательный потенциал для науки о материалах.

1

/подпись/

**Химический исследовательский институт
Актиниум
Директор по научной части
доктор, профессор Франко Кательдо**

Все результаты, представленные в автореферате, являются новыми и научно значимыми. Они широко представлены в периодической литературе. Согласно цитированиям, работы автора высоко востребованы фуллереновым научным сообществом. Таким образом, я рад полагать, что Денис Сабиров отвечает всем требованиям для получения докторской степени Московского государственного университета по специальности «физическая химия».

Проф. Франко Кательдо
Директор по научной части
Химический исследовательский институт
Актиниум
Директор по научной части: доктор, профессор
Франко Кательдо
Виа Касилина 1626А, 00133 Рим, Италия

/подпись/
Химический исследовательский институт
Актиниум
Директор по научной части
доктор, профессор Франко Кательдо

Профессор общей химии
Университета Тушии,
Витербо, Италия

Главный редактор журнала
«Fullerenes Nanotubes & Carbon Nanostructures»
издательства Taylor & Francis, США

2

Перевод с английского языка на русский язык сделан мной, Козлотиной Татьяной Игоревной. Правильность перевода подтверждаю

С.И. Козлотиной

Российская Федерация
Город Москва.

Тринадцатого декабря две тысячи семнадцатого года.

Я, Юлдашева Татьяна Васильевна, нотариус города Москвы, свидетельствую подлинность подписи переводчика Козлотиной Татьяны Игоревны.

Подпись сделана в моем присутствии.

Личность подписавшего документ установлена.

Зарегистрировано в реестре: № 4-5443

Взыскано государственной пошлины (по тарифу): 100 руб. 00 коп.

Уплачено за оказание услуг правового и технического характера: 200 руб. 00 коп.

Т.В. Юлдашева

