

12 December 2017

119991 Moscow, Leninskie gory, 1, building 3,
Faculty of Chemistry of Moscow State University,
Dissertation Council MFY.02.04.

To whom it may concern:

Re: Review of the Synopsis of the Doctoral Thesis of Denis Sh. SABIROV

It is with pleasure that I write in support of the award of the Doctorate in Physical Chemistry to Mr. Denis Sabirov, after reading the synopsis of his doctoral thesis entitled '**A Theoretical Study on Polarizability of Fullerenes and Their Compounds**' and several of his papers.

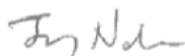
In his doctoral research, Denis Sh. Sabirov has carried out theoretical and computational investigations of one of the most important groups of organic semiconductors, fullerene compounds. His particular focus, the polarizability of these molecules, is important scientifically and for a number of potential applications. The joint use of density functional theory methods and additive schemes allowed him to extract understanding of the "structure – polarisability" and "structure – anisotropy of polarisability" relationships for fullerenes ions (Chapter 3), fullerene adducts (Chapter 4), fullerene oligomers (Chapter 5), and endofullerenes (Chapter 6). The polarisability of the mentioned compounds can deviate from linear law with either negative or positive deviation. In the case of the fullerene adducts, Sabirov succeeded obtaining an analytical expression to take account the nonlinear behaviour.

The author demonstrated that polarisability relates to the physicochemical processes and may be invoked by material scientists for deeper understanding the processes in fullerene-containing systems. The non-additivity of polarisability provides numerical estimates of the screening effect in endofullerenes whereas anisotropy of polarisability of fullerene adducts correlates with the power conversion efficiency of organic solar cells based on them. These features help to provide design rules for the development of improved electronic devices and will continue be of great interest to the international scientific community studying the science and application of molecular semiconductors.

The results presented in the Synopsis are, to my knowledge, a novel and sufficient contribution to the physical chemistry of fullerenes. Based on the results, the author makes his own conception of the polarizability of fullerene compounds. The results of the doctoral research are presented in the scientific literature (including Royal Society of Chemistry journals *PCCP* and *RSC Advances*) and appropriately cited.

Based on the above, I consider that Denis Sh. Sabirov deserves the doctoral degree of Moscow State University in the field of physical chemistry.

Yours sincerely,



Jenny Nelson FRS,
Professor of Physics, Imperial College London

Перевод

Факультет физики
Имperial-Колледжа Лондона
Лаборатория Блэкетта
Принс Консорт роад
Лондон SW7 2AZ
Тел.: +44 (0) 20 7594 7581
Jenny.nelson@imperial.ac.uk

12 декабря 2017

119991 Москва, Ленинские горы, 1, стр. 3,
Химический факультет Московского государственного университета
Диссертационный совет МГУ.02.04

Для предоставления по месту требования:

Отзыв на автореферат докторской диссертации Дениса Сабирова

После прочтения автореферата его докторской диссертации «**Теоретическое исследование поляризуемости фуллеренов и их производных**» и нескольких его работ я с удовольствием пишу в поддержку присуждения докторской степени в области физической химии г-ну Денису Сабирову.

В своем диссертационном исследовании, Денис Сабиров провел теоретические и вычислительные исследования соединений фуллеренов — одной из важнейших групп органических полупроводников. В фокусе его работы поляризуемость этих молекул важна как с научной, так и, потенциально, с практической точки зрения в ряде отраслей. Совместное использование методов теории функционала плотности и аддитивных схем позволило автору выявить отношения «структура–поляризуемость» и «структура–анизотропия поляризуемости» для фуллереновых ионов (глава 3), фуллереновых аддуктов (глава 4), фуллереновых олигомеров (глава 5) и эндофуллеренов (глава 6). Поляризуемость упомянутых соединений имеет положительное или отрицательное отклонение от линейного закона. В случае фуллереновых аддуктов, Сабирову удалось получить аналитическое выражение для учета нелинейного поведения.

Автор продемонстрировал, что поляризуемость имеет отношение к физико-химическим процессам и может быть привлечена материаловедами для более глубокого понимания процессов в фуллерен-содержащих системах. Неаддитивность поляризуемости дает возможность оценить эффект экранирования в эндофуллеренах, тогда как анизотропия поляризуемости фуллереновых аддуктов коррелирует с эффективностью преобразования энергии в органических солнечных ячейках на их основе. Эти особенности помогают сформулировать правила дизайна для создания улучшенных электронных устройств и будут весьма интересны международному научному сообществу, изучающему науку и приложения молекулярных полупроводников.

Представленные в автореферате результаты, по моему мнению, являются новым и достаточным вкладом в физическую химию фуллеренов. Основываясь своих результатах, автор создает собственную концепцию поляризуемости соединений фуллеренов. Результаты докторской диссертации представлены в научной литературе (включая журналы Королевского химического общества СССР и RSC Advances).

Основываясь на вышесказанном, я считаю, что Денис Сабиров заслуживает докторской степени Московского государственного университета по специальности «физическая химия».

С уважением,
/подпись/
Дженни Нельсон,
Член Королевского научного общества,
Профессор физики Империял-Колледжа Лондона

Империял-Колледж Лондона

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

Т. 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: № *4-5442*

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

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



Т.В. Юлдашева

Т.В. Юлдашева