

Заключение диссертационного совета МГУ.02.04
по диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук

Решение диссертационного совета от «15» декабря 2017 г. № 12
о присуждении Сабирову Денису Шамилевичу, гражданину Российской
Федерации ученой степени доктора химических наук.

Диссертация «Теоретическое исследование поляризуемости фуллеренов и их производных» по специальности 02.00.04 – «физическая химия», принята к защите диссертационным советом 6 октября 2017 г., протокол № 5.

Соискатель Сабиров Денис Шамилевич, 1984 года рождения диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук «Интермедиаты озонлиза фуллеренов и реакционная способность фуллеренов в реакциях 1,3-диполярного присоединения» защитил в 2009 году в диссертационном совете Д212.013.10 при Башкирском государственном университете. В 2013 г. получил ученое звание доцента по специальности 02.00.04 «физическая химия».

Соискатель работает старшим научным сотрудником ФГБУН «Институт нефтехимии и катализа Российской академии наук».

Диссертация выполнена в лаборатории химии высоких энергий и катализа ФГБУН «Институт нефтехимии и катализа Российской академии наук».

Официальные оппоненты:

Коваленко Валерий Игнатьевич, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории физико-химического анализа ФГБУН «Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова Казанского научного центра Российской академии наук»,

Борисов Юрий Андреевич, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории механизмов реакций ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии

наук»,

Дьячков Павел Николаевич, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии ФГБУН «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высокой компетентностью в области квантовой химии и физической химии фуллеренов и наличием публикаций в этой области исследования.

Соискатель имеет 120 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 43 работы, из них 33 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 02.00.04 – «физическая химия». Наиболее важные статьи по теме диссертации:

1. **D. Sh. Sabirov.** Polarizability as a landmark property for fullerene chemistry and materials science // *RSC Adv.* – 2014. – V. 4. – P. 44996–45028.
2. E. Yu. Pankratyev, A. A. Tukhbatullina, **D. Sh. Sabirov.** Dipole polarizability, structure, and stability of [2+2]-linked fullerene nanostructures $(C_{60})_n$ ($n \leq 7$) // *Physica E.* – 2017. – V. 86. P. 237–242.
3. **D. Sh. Sabirov.** The C_{70} fullerene adducts with low anisotropy of polarizability are more efficient electron acceptors for organic solar cells. The minimum anisotropy hypothesis for efficient isomer-free fullerene-adduct photovoltaics // *J. Phys. Chem. C.* – 2016. – V. 120. – P. 24667–24674.
4. **D. Sh. Sabirov,** A. O. Terentyev, R. G. Bulgakov. Counting the isomers and estimation of anisotropy of polarizability of the selected C_{60} and C_{70} bisadducts promising for organic solar cells // *J. Phys. Chem. A.* – 2015. – V. 119. – P. 10697–10705.

5. **D. Sh. Sabirov**, A. O. Terentyev, R. G. Bulgakov. Polarizability of fullerene [2+2]-dimers: a DFT study // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2014. – V. 16. – P. 14594–14600.
6. **D. Sh. Sabirov**, R. R. Garipova, R. G. Bulgakov. A density functional theory study on the decay of fullerenyl radicals $RC_{60}^{\bullet}$, $ROC_{60}^{\bullet}$, and $ROOC_{60}^{\bullet}$ (R = *tert*-butyl and cumyl) and polarizability of the formed fullerene dimers // *J. Phys. Chem. A*. – 2013. – V. 117. – P. 13176–13183.
7. **D. Sh. Sabirov**. Polarizability of C_{60} fullerene dimer and oligomers: the unexpected enhancement and its use for rational design of fullerene-based nanostructures with adjustable properties // *RSC Adv.* – 2013. – V. 3. – P. 19430–19439.
8. **D. Sh. Sabirov**. Anisotropy of polarizability of fullerene higher adducts for assessing the efficiency of their use in organic solar cells // *J. Phys. Chem. C*. – 2013. – V. 117. – P. 9148–9153.
9. **D. Sh. Sabirov**. From endohedral complexes to endohedral fullerene covalent derivatives: a density functional theory prognosis of chemical transformation of water endofullerene $H_2O@C_{60}$ upon its compression // *J. Phys. Chem. C*. – 2013. – V. 117. – P. 1178–1182.
10. **D. Sh. Sabirov**, R. R. Garipova, R. G. Bulgakov. Polarizability of C_{70} fullerene derivatives $C_{70}X_8$ and $C_{70}X_{10}$ // *Fullerenes Nanotubes Carbon Nanostruct.* – 2012. – V. 20. – P. 386–390.
11. **D. Sh. Sabirov**, A. A. Tukhbatullina, R. G. Bulgakov. Dependence of static polarizabilities of $C_{60}X_n$ fullerene cycloadducts on the number of added groups X = CH_2 and NH ($n = 1-30$) // *Comput. Theor. Chem.* – 2012. – V. 989. – P. 18–22.
12. **D. Sh. Sabirov**, R. R. Garipova, R. G. Bulgakov. General formula for accurate calculation of halofullerenes polarizability // *Chem. Phys. Lett.* – 2012. – V. 523. – P. 92–97.

13. **D. Sh. Sabirov**, R. G. Bulgakov. Polarizability of oxygen-containing fullerene derivatives $C_{60}O_n$ and $C_{70}O$ with epoxide / oxidoannulene moieties // *Chem. Phys. Lett.* – 2011. – V. 506. – P. 52–56.
14. **Д. Ш. Саби́ров**, Р. Г. Булгаков. Экзальтация поляризуемости эндофуллеренов $X@C_n$ ($n = 20, 24, 28, 36, 50, 60$; X – атом благородного газа) // *Письма в ЖЭТФ*. – 2010. – Т. 92. – №10. – С. 730–734.
15. **Д. Ш. Саби́ров**, С. Л. Хурсан, Р. Г. Булгаков, У. М. Джеми́лев. Новый подход к оценке реакционной способности фуллеренов в реакциях 1,3-диполярного присоединения с использованием индексов поляризуемости // *Докл. АН*. – 2009. – Т. 425. – С. 196–198.

На диссертацию и автореферат поступило 9 отзывов, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение: установлена связь между строением и поляризуемостью разных классов соединений фуллеренов, что важно для направленного дизайна функциональных материалов на их основе.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в физическую химию:

- 1) Впервые предложена и обоснована теоретическая концепция поляризуемости соединений фуллеренов, которая учитывает различные виды неаддитивности этого свойства, связанные с изменением π -электронной системы фуллеренового каркаса, и позволяет объяснить рассчитанные значения средней поляризуемости экзоэдральных и эндоэдральных производных фуллеренов.
- 2) Для экзоэдральных производных фуллеренов предложено эмпирическое

соотношение, определяющее среднюю поляризуемость молекулы через число и поляризуемость аддендов.

- 3) Впервые использована величина депрессии поляризуемости для оценки эффективности экранирования эндоэдрального кластера фуллереновым каркасом.
- 4) Показана корреляция между анизотропией поляризуемости фуллереновых производных и характеристиками фотовольтаических устройств с объемным гетеропереходом на их основе.

На заседании 15 декабря 2017 года диссертационный совет принял решение присудить Сабирову Д. Ш. ученую степень доктора химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 12, против 2, недействительных бюллетеней 2.

18 декабря 2017 г.

Председатель диссертационного совета
академик РАН, д.х.н., профессор

 Лунин В. В.

Ученый секретарь диссертационного совета
к.х.н., доцент


 Шилина М. И.