

Экспертное заключение №2014-14.B25.31.0005-2-001
по отчетным материалам и результатам работ по промежуточному этапу №2
Договора № 14.B25.31.0005 от 24.06.2013

Направление научного исследования: Методы теоретического прогнозирования материалов с заданными физическими свойствами

Область наук: 01.17 Химия

Исполнитель: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Самарский государственный университет"

Ведущий ученый: Прозерпио Давиде Мария

Объем бюджетного финансирования отчетного этапа (руб.): 31 093 700,00

Объем софинансирования отчетного этапа со стороны вуза (руб.): 6 500 000,00

Срок исполнения этапа (начало-окончание): 01.01.2014 - 31.12.2014

Вопросы эксперту

1. Объемы и качество достигнутых научных результатов с учетом ранее заявленных планов (оцениваются: достижение научной цели и решение научных задач проекта; выполнение заявленного плана научных исследований; уровень полученных научных/научно-технических результатов, их соответствие мировому уровню и востребованность в масштабах мировой науки; адекватность затрат на проект с учетом инфраструктурного обеспечения, оборудования, приобретенного для выполнения научных исследований)

Цель данного проекта - разработка алгоритмов и программного обеспечения для экспертной системы по теоретическому материаловедению и создание экспертной системы, устанавливающей корреляции между химическим составом и топологическими свойствами кристаллических структур 1-, 2- и 3-периодических координационных полимеров. Разработана методика расчета электронной структуры неорганических ионных, металл-органических, органических, микропористых материалов квантово-химическими методами и их интеграция в экспертную систему. За отчетный период с помощью комплекса программ ToposPro созданы базы данных топологических дескрипторов для всех известных 1-, 2- и 3-периодических координационных полимеров - всего более 15000 записей. Разработаны принципы поиска корреляций между этими дескрипторами и применения этих корреляций для формирования экспертного заключения с помощью машины вывода. Автоматизирован поиск корреляций в базе знаний, для чего разработана программа CSRS. Созданы базы знаний по топологии молекулярных упаковок, образованных за счет водородных связей и специфических взаимодействий галоген-галоген. Найдены корреляции между глобальной топологией комплексной группировки, химическим составом и особенностями локальной геометрии и топологии атомов-комплексообразователей и лигандов для 811 цианид-содержащих координационных соединений. Для молекулярных кристаллов с водородными связями обнаружены схожие корреляции между локальным способом связывания молекул и общим топологическим мотивом всей супрамолекулярной архитектуры. Разработана схема функционирования машины вывода экспертной системы для прогнозирования атомных топологических мотивов структурных группировок в координационных полимерах и молекулярных кристаллах. Разработаны принципы интеграции топологических методов описания кристаллических структур и квантово-химических методов. На этой основе проведен анализ более 600000 теоретически возможных атомных сеток и выделены шесть потенциальных новых аллотропов углерода с энергией связи, не превышающей 0.12 эВ по сравнению с решеткой алмаза. Анализ рассчитанной зонной структуры показал, что три найденных аллотропа должны обладать высокой твердостью и прозрачностью. Заявленный план научных исследований на 2014 г. выполнен полностью. Уровень полученных научных результатов соответствует мировому уровню в области исследований. Можно ожидать высокую востребованность полученных результатов в масштабах мировой науки. Затраты на проект с учетом инфраструктурного обеспечения, оборудования, приобретенного для выполнения научных исследований, адекватны затраченным усилиям и полученным результатам.

2. Уровень научных публикаций по проекту (статьи в международных рецензируемых журналах, монографии, главы в монографиях, труды международных конференций), результаты изобретательской деятельности, уровень интеграции в академическое и бизнес-сообщество (оцениваются: количество статей, монографий, опубликованных докладов на конференциях, подготовленных ведущим ученым и членами научного коллектива по результатам научных исследований по проекту, а также уровень и академическая репутация соответствующих журналов, издательств, конференций; количество поданных заявок на выдачу патента на изобретение, полезную модель или промышленный образец и др., полученных свидетельств, патентов по направлению научного исследования, а также внедрение результатов научно-технической деятельности, если такое было предусмотрено планом научных исследований, и/или такие факты имели место)

Полученные по проекту результаты опубликованы в 14 научных статьях. Среди них отметим международные журналы самого высокого уровня, таких как Chemical Reviews (IF 45.661), Crystal Growth & Design (IF 4.558), Dalton Transactions (IF 4.097), CrystEngComm (IF 3.858), New Journal of Chemistry (IF 3.159), Journal of Solid State Chemistry (IF 2.200) и др. Укажем, что публикация по комплексу программ ToposPro в журнале Crystal Growth & Design более полугода занимает первое место в списке наиболее читаемых статей этого журнала. Это прямо свидетельствует о востребованности результатов проекта мировой наукой.

Уровень интеграции в академическое и бизнес-сообщество характеризуют установленные научные контакты и проведенные совместные исследования с экспериментальными лабораториями в России (Москва, Черноголовка, Санкт-Петербург, Екатеринбург) и за рубежом (Технический университет, Фрайберг, Германия; Миланский университет, Италия).

Все совместные исследования проведены в области поиска новых катион-проводящих материалов, пористых адсорбентов и катализаторов и соответствовали научному плану работ на 2014 г..

3. Доклады на международных конгрессах, конференциях, симпозиумах, научных семинарах по тематике проекта (оцениваются: результаты очного участия ведущего ученого и членов научного коллектива в конгрессах, конференциях, симпозиумах, научных семинарах по тематике научных исследований проекта; уровень данных мероприятий (международный, всероссийский, региональный и т.д.); количество сделанных докладов ведущим ученым и членами научного коллектива и уровень этих докладов (приглашенный, обычный, устный, постер и пр.); степень участия в указанных докладах членов научного коллектива, основным местом работы которых является российская организация, на базе которой проводится научное исследование)

Коллективом проведена Международная конференция 14-th V.A. Fock Meeting on Quantum and Computational Chemistry, и Школы "Первая всероссийской научная школа «Топологические методы в кристаллохимии и материаловедении» и международная научная школа «Topological methods for expert systems in materials science». К сожалению, в отчете не указано, сколько докладов сделали рядовые члены научного коллектива и каков уровень этих докладов. Из представленных материалов понятно, что Прозерпио, Блатов и Шевченко - ведущие ученые проекта - читали основные лекции.

4. Кадровый состав лаборатории и степень его участия в реализации проекта (оцениваются: кадровый состав лаборатории, в том числе наличие в составе коллектива молодых ученых, студентов, аспирантов; степень участия членов научного коллектива лаборатории в реализации проекта; способность коллектива лаборатории решать сложные научные/научно-технические задачи, проводить научные исследования и получать научные результаты, соответствующие мировому уровню, в том числе в случае отъезда ведущего ученого и приглашенных из других организаций сотрудников)

В работе научного коллектива принимали участие 27 чел, в том числе, 23 человек из организации, на базе которой проводятся исследования (Самарский государственный университет). Аспирантов 7 чел., студентов 3 чел. Достигнутые значения показателей эффективности выполнения научного исследования в 2014 году выполнены и перевыполнены по всем позициям, кроме 4-х:

- "Количество кандидатских диссертаций, защищенных сотрудниками лаборатории по заявленному направлению научного исследования";
- "Количество членов научного коллектива, принятых в аспирантуру и докторантуру по направлению научного исследования, или утвержденных в качестве соискателей ученых степеней за отчетный период";
- "Количество молодых ученых, специалистов и преподавателей (кандидатов наук в возрасте до 35 лет и докторов наук в возрасте до 40 лет, специалистов и преподавателей без ученой степени в возрасте до 30 лет) из сторонних организаций, прошедших профессиональную переподготовку или повышение квалификации в лаборатории по направлению научного исследования за отчетный период";
- "Количество объектов интеллектуальной собственности, документы об охране которых получены организацией за отчетный период по направлению научного исследования".

Судя по отчету и по уровню и количеству публикаций, коллектив лаборатории способен решать сложные научные/научно-технические задачи, проводить научные исследования и получать научные результаты мирового уровня в случае отъезда ведущего ученого.

5. Созданная инфраструктура лаборатории (оцениваются: современность созданной инфраструктуры лаборатории; возможность проведения на ее основе научных исследований, соответствующих мировому уровню)

За период 2014 г. создана полноценная научная лаборатория, обладающая современной инфраструктурой. Лаборатория оснащена современной компьютерной техникой, оригинальным и коммерческим научным программным обеспечением. Сформирован кадровый состав, сочетающий ядро их признанных мировой наукой ученых, молодых кандидатов наук и аспирантов и студентов. Эффективность нового коллектива подтверждена высоким уровнем научных публикаций, выведших лабораторию на современный мировой научный уровень.

6. Подготовка научных и педагогических кадров и участие в образовательной деятельности (оцениваются: руководство студентами и аспирантами, в том числе из других организаций, которое осуществляют ведущий ученый и сотрудники лаборатории; чтение образовательных курсов для студентов и аспирантов российских организаций по направлению научного исследования; подготовка учебных пособий, сайтов и прочих образовательных материалов по тематике проекта; организация региональных, всероссийских и международных конференций, школ и семинаров по тематике проекта; организация стажировок студентов, аспирантов и научных сотрудников лаборатории в ведущих российских и международных научно-образовательных центрах по направлению научного исследования; организация проведения профессиональной переподготовки или повышения квалификации по направлению научного исследования молодых ученых, специалистов и преподавателей из сторонних организаций)

В 2014 г. ведущий ученый проф. Прозерпио и ведущие сотрудники с российской стороны проф. Блатов и д-р. Шевченко осуществляли руководство студентами и аспирантами. Сюда следует отнести аспирантов их других организаций и даже стран. Ведущий ученый и сотрудники лаборатории проводили чтение образовательных курсов для студентов и аспирантов российских организаций по направлению научного исследования. Подготовлены сайты по проведенным школам. К сожалению, в отчете нет данных о подготовке учебных пособий и других образовательных материалов по тематике проекта. Организован ряд всероссийских и международных конференций и школ по тематике проекта. Проведены стажировки студентов, аспирантов и научных сотрудников лаборатории в ведущих российских и международных научно-образовательных центрах по направлению научного исследования. Защищены несколько дипломных работ разного уровня, подготовлены к защите 3 кандидатских диссертации.

7. Выводы и рекомендации эксперта (дается общее заключение по результатам выполненной работы; делается вывод о целесообразности или нецелесообразности продолжения проведения научных исследований и их финансирования на следующем этапе; даются рекомендации по проведению научных исследований на следующем этапе)

Проект посвящен созданию лаборатории, направленной на создание и применение экспертной системы по теоретическому материаловедению функциональных неорганических ионных, металл-органических, органических, микропористых материалов. На этапе 2014 г. отработаны десятки тысяч структур координационных полимеров и молекулярных кристаллов, созданы первые прототипы баз знаний и показано, что алгоритмы, которые планируется использовать в машине вывода экспертной системы, позволяют успешно прогнозировать способы связывания структурных единиц различной химической природы. Объединение топологических и квантово-химических методов анализа структуры твердых тел позволило получить новые результаты, которые недоступны при использовании каждой группы методов в отдельности. Сформирована программно-алгоритмическая и методическая основа для создания в ходе дальнейшей работы прототипа экспертной системы. Намеченный на 2014 г. научный план полностью выполнен. В итоге, создана работающая лаборатория с современной инфраструктурой, в работе которой активно участвуют молодые ученые, аспиранты и студенты. Проведены 2 научные школы и крупная международная конференция. Достигнут мировой уровень научных публикаций, при их значительном числе. Лаборатория уже установила рабочие научные контакты с крупными научными центрами в РФ и зарубежом. Все это привлекло к работе новой лаборатории интерес мировой научной общественности. Считаю безусловно целесообразным продолжение научных исследований по данному проекту и их финансирование на следующем этапе. В качестве рекомендации по проведению научных исследований рекомендую в квантово-химической части расчетов 1) учитывать дисперсионную поправку (DFT-D) и 2) проводить анализ частот, чтобы убедиться, что полученная структура отвечает минимуму потенциальной энергии, а не переходному состоянию.

Подпись эксперта: _____ (_____)
13 февраля 2015 г.