

**Экспертное заключение №2016-14.В25.31.0005-4-001
по отчетным материалам и результатам работ по этапу №4
Договора № 14.В25.31.0005**

Этап работ: промежуточный

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

Область наук: 01.17 Химия

Организация: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева"

Ведущий ученый: Прозерпио Давиде Мария

Объем бюджетного финансирования этапа работ (руб.): 30 000 000,00

Объем софинансирования этапа работ (руб.): 10 000 000,00

Срок выполнения работ (начало-окончание): 01.01.2016 - 31.12.2016

1.	Научные результаты проекта. Оценивается полнота и качество выполнения плана научных исследований.
№ п/п	Вопросы/Ответы
1.1	Эксперт дает характеристику полученных научных результатов, содержащую в том числе следующую информацию: об уровне полученных научных результатов, их соответствии мировому уровню и востребованности в масштабах мировой науки; о выполнении плана научных исследований, указываются наиболее значимые результаты; имеются ли замечания по выполненным исследованиям (необходимо перечислить выявленные недостатки); о перспективах достижения целей и решения научных задач проекта; указывается перечень требуемых доработок, и даются рекомендации по устранению выявленных недостатков (при наличии).
	-
Комментарии	<p>Согласно представленным материалам отчета, выполнение научной части этапа 2016 идет в соответствии с планом: уровень достигнутых результатов можно охарактеризовать как отвечающий современному мировому уровню. Востребованность результатов данного проекта (как и выбранного направления в целом) очень высока, что объясняется значительным объемом экспериментальной структурной информации о кристаллическом строении органических, металлоорганических и неорганических веществ, накопленной в электронных базах данных, а с другой - необходимостью систематизировать ее на фундаментальном теоретическом уровне, установив связь между природой, строением и составом структурообразующих элементов и кристаллической структурой объемного вещества. Поиск эмпирических корреляций является первичным уровнем, за ним следует этап систематизации и классификации, который может вывести на фундаментальные физические модели. Результаты выполнения пп 1-4 и 6 отражены в отчете руководителя проекта как успешные, с чем трудно спорить.</p> <p>На мой достаточно субъективный взгляд, весьма интересна работа по п.2, где говорится о создании базы знаний, хранящей информацию о встречаемости нанокластеров того или иного типа в структуре интерметаллидов с возможностью поиска более простых нанокластерных фрагментов в сложных нанокластерах и в структуре интерметаллида в целом.</p> <p>Что касается конкретных оценок эффективности разработанных алгоритмов и методов классификации, то я бы предпочел опереться здесь на мнение квалифицированных пользователей базы TOPOS, независимых от ее разработчиков. Однако ни с одним из них я, увы, не знаком, а самому мне, к сожалению, работать с этой базой еще не довелось. Но я склонен довериться мнению рецензентов, оценивших результаты, полученные с ее применением, достойными для их опубликования в международных журналах с высоким уровнем цитирования.</p> <p>Что касается вопросов замечаний (я их уже высказывал ранее), то они касаются лицензионных проблем. А именно, правильно ли я понимаю, что сам TOPOS не содержит записей кристаллографических структурных данных (библиографическая ссылка, группа симметрии, число молекул в элементарной ячейке, координаты атомов), но использует для генерации дескрипторов другие лицензионные базы данных: CSD, ICSD, Pearson's. Значит ли это, что для полноценного пользования TOPOS'ом, его покупателю необходимо приобретать и вышеуказанные БД тоже (если доступ к ним отсутствует)?</p>
2.	Научные публикации, участие в конференциях, результаты интеллектуальной деятельности. Оцениваются статьи в международных рецензируемых журналах, монографии, главы в монографиях, труды международных конференций, участие в научных мероприятиях: доклады на международных конгрессах, конференциях, симпозиумах, научных семинарах по тематике проекта, результаты интеллектуальной деятельности.
№ п/п	Вопросы/Ответы
2.1	Эксперт дает оценку научных публикаций, участия в конференциях, результатов интеллектуальной деятельности, содержащую в том числе следующую информацию: количество и качество статей, монографий, подготовленных ведущим ученым и членами научного коллектива по результатам научных исследований по проекту; уровень и академическая репутация соответствующих журналов,

	издательств; результаты очного участия ведущего ученого и членов научного коллектива в конгрессах, конференциях, симпозиумах, научных семинарах по тематике научных исследований проекта: уровень данных мероприятий и академическая репутация; количество и качество 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 российский вуз, на базе которого проводится научное исследование; количество поданных заявок на выдачу патента на изобретение, полезную модель или промышленный образец и т. п., полученных свидетельств, патентов по направлению научного исследования; достаточно ли продуктивно работает лаборатория в плане публикаций и результатов интеллектуальной деятельности; необходимо отметить степень вовлеченности ведущего ученого в деятельность лаборатории и работу по проекту, например, публикуется ли ведущий ученый независимо от других членов лаборатории (по своему основному месту работы) или только совместно с членами научного коллектива.
	-
Комментарии	Опубликовано 13 научных статей, в том числе в международных журналах самого высокого уровня: Angewandte Chemie (IF 11.709), Crystal Growth & Design (IF 4.425), CrystEngComm (IF 3.849). Доклады на научных конференциях по тематике научных исследований в рамках проекта: - международных (Испания, Швейцария, Франция, Ирландия): 1 приглашенный, 2 устных, 11 стендовых - всероссийские: 2 приглашенных, 9 устных, 17 стендовых В целом оцениваю уровень конференций как достаточно высокий и вполне представительный Свидетельства о государственной регистрации баз данных - 2 Поданные заявки на госрегистрацию баз данных - 2 и программ - 1 - считаю работу лаборатории в плане публикаций и РИД весьма продуктивной Степень вовлеченности ведущего ученого в деятельность лаборатории - имеются отдельные публикации ведущего ученого в составе коллектива соавторов, в котором отсутствуют другие участники настоящего проекта, но не в качестве основного (corresponding) автора и с указанием самарского госуниверситета вторым местом работы наряду с основным
3.	Лаборатория, созданная в рамках проекта. Оцениваются результаты создания лаборатории: инфраструктура и кадровый состав лаборатории, активность лаборатории в получении финансирования, участие в международных проектах, устойчивость лаборатории.
№ п/п	Вопросы/Ответы
3.1	Эксперт дает характеристику созданной в рамках проекта лаборатории, содержащую в том числе следующую информацию: о наличии в составе лаборатории специалистов с необходимыми компетенциями, сбалансированность кадрового состава лаборатории, в том числе наличие в составе коллектива молодых ученых, студентов, аспирантов; доля приглашенных из других организаций сотрудников; степень участия сотрудников лаборатории в реализации проекта; уровень созданной инфраструктуры лаборатории, в том числе оценка имеющегося оборудования; возможность проведения на основе созданной инфраструктуры научных исследований, соответствующих мировому уровню; количество и объем дополнительно полученных грантов, государственных контрактов по проведению исследований и т. п.; количество и объем выполненных коммерческих договоров (если направление деятельности лаборатории предполагает возможность выполнения таких работ); внедрение результатов научной деятельности (коммерческое использование результатов работы, если такие факты имели место); участие лаборатории в научных коллаборациях и международных проектах; способность коллектива лаборатории решать сложные научные/научно-технические задачи, проводить научные исследования и получать научные результаты, соответствующие мировому уровню после окончания текущей грантовой поддержки, отъезда ведущего ученого и приглашенных из других организаций сотрудников. Указываются возможные риски, влияющие на устойчивость лаборатории (условия, при которых лаборатория не сможет продолжить свою деятельность и будет закрыта).
	-
Комментарии	Кадровый состав в отношении квалификации и возрастного состава оптимален. Считаю, что коллектив лаборатории способен 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 Центре оборудован высокопроизводительный вычислительный кластер, мощность которого в отчетный период существенно увеличена за счет приобретения дополнительных устройств. Сервер укомплектован необходимыми пакетами системных программ, компиляторов и математических библиотек. Для выполнения прикладных задач, наряду с ПО и БД из числа собственных разработок, имеется набор известных зарубежных программ для проведения модельных расчетов структуры, динамики и физических свойств молекулярных и кристаллических систем. (Правда, почему то в списке ПО не значится наличие баз данных кристаллических структур ICSD, CSD и Pearson's Crystal Data). Дополнительно полученные гранты: один грант РФ (6 млн. руб.) и три гранта РФФИ (660, 800 и 450 тыс. руб.) Внедрение результатов: продано на общую сумму 1499 долларов США четыре копии баз знаний в разной комплектации частным пользователям для анализа и прогнозирования структуры кристаллических веществ и материалов (однако не зачтены как показатель эффективности согласно замечанию Оператора). Считаю, что коллектив Центра безусловно способен решать сложные научные/научно-технические задачи, проводить научные исследования и получать научные результаты, соответствующие мировому уровню после окончания текущей грантовой поддержки (что не исключает сохранения достойного

	уровня оплаты труда его сотрудников) и отъезда ведущего ученого.
4.	Подготовка кадров. Оценивается активность лаборатории в подготовке научных и педагогических кадров, участие в образовательной деятельности.
№ п\п	Вопросы/Ответы
4.1	Эксперт дает комментарий по соответствующим объектам оценки, содержащий в том числе следующую информацию: руководство студентами и аспирантами, докторантами, 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 для молодых исследователей и семинаров по направлению деятельности лаборатории; организация стажировок студентов, аспирантов и научных сотрудников лаборатории в ведущих российских и международных научно-образовательных центрах по направлению деятельности лаборатории; организация проведения профессиональной переподготовки или повышения квалификации по направлению деятельности лаборатории молодых ученых, специалистов и преподавателей из сторонних организаций.
	-
Комментарии	Количество аспирантов и студентов в составе научного коллектива 9 и 6 соответственно. Проведение 7 международных вебинаров и 1 онлайн школы с общим количеством участников 135 человек Количество молодых участников проекта, прошедших стажировку в других российских и зарубежных лабораториях - 8.
5.	Выводы и рекомендации эксперта.
№ п\п	Вопросы/Ответы
5.1	Дается общее заключение по результатам выполненного проекта и создания лаборатории с учетом оценки эксперта по п. 1-4, в том числе содержащее вывод: о научных результатах проекта; о публикационной активности научного коллектива лаборатории; о выполнении показателей эффективности выполнения проекта; об организационной, кадровой и финансовой устойчивости созданной лаборатории и ее возможности продолжить свою работу после реализации проекта и выполнять научные исследования, соответствующие мировому уровню. Оцениваются перспективы развития лаборатории. Указываются недостатки реализации проекта в целом. Даются рекомендации по направлениям развития лаборатории.
	-
Комментарии	Считаю выполнение этапа проекта в целом весьма успешным. Публикации в международных журналах с высоким рейтингом (в том числе одной статьи в соавторстве с нобелевским лауреатом Роальдом Хоффманом), участие в научных конференциях вероссийского и международного уровня, стажировки молодых ученых в зарубежных центрах, проведение серии вебинаров и онлайн-школы для англоязычной аудитории достаточно показательны. Вместе с тем, в том, что касается коммерческой реализации разрабатываемых научных программ и баз знаний, то здесь зримые успехи отсутствуют. Я полагаю, что распространение TOPOS на платной основе - отнюдь не самая лучшая идея. Напротив, есть смысл открыть бесплатный онлайн доступ к продуктам TOPOS по примеру ряда известных сайтов научных данных (в числе которых БД структур цеолитов: см. http://www.iza-structure.org/databases/ , http://www.hypotheticalzeolites.net/ , http://epinet.anu.edu.au/), что качественно расширит круг их пользователей. Другой маркетинговый прием поиска потребителя ПО - это предложение компаниям-разработчикам структурных баз данных ICSD, CSD и Pearson's Crystal Data распространять ежегодные обновления своих банков "в одном пакете" с БД TOPOS (последний идет как бесплатный довесок к основному продукту). Как бы то ни было, но я не знаю случаев удачного запуска новых IT продуктов (не считая обновлений старых), которые начинали бы сразу с коммерческих продаж, минуя этап 'licensing for free'. В свете сказанного рассчитывать на выход Центра на самоокупаемость за счет коммерческих продаж своих продуктов, по крайней мере, на ближайшую перспективу не приходится. Что бы я еще рекомендовал, то это развернуть исследования Центра больше в сторону органических веществ, где существует такая проблема, как предсказание полиморфных модификаций кристаллов (имеющая прямое отношение к патентованию лекарств), проблема предсказания твердофазной структуры и стабильности высокоэнергетических материалов (ВВ и ракетных топлив), проблема поиска высокоэффективных электролюминесцентных материалов для светодиодов и экранов мобильных устройств и др.
6.	Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ
№ п\п	Вопросы/Ответы
6.1	Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ
	Рекомендуется принять работу по исследованию после устранения незначительных замечаний
Комментарии	При проведении экспертизы у меня отсутствует конфликт интересов: нет научной или административной связи с участниками проекта; нет прямой заинтересованности в результатах конкурса, иных факторов, влияющих на беспристрастность оценки данной заявки.

Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ:

Рекомендуется принять работу по исследованию после устранения незначительных замечаний

При проведении экспертизы у меня отсутствует конфликт интересов: нет научной или административной связи с участниками проекта; нет прямой заинтересованности в результатах конкурса, иных факторов, влияющих на беспристрастность оценки данной заявки.

При проведении экспертизы у меня отсутствует конфликт интересов: нет научной или административной связи с участниками проекта; нет прямой заинтересованности в результатах конкурса, иных факторов, влияющих на беспристрастность оценки данной заявки.

Подпись эксперта: _____ (_____)
17 февраля 2017 г.