

**Экспертное заключение №2017-14.B25.31.0005-5-001
по отчетным материалам и результатам работ по этапу №5
Договора № 14.B25.31.0005**

Этап работ: итоговый

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.): 0,00

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

Срок выполнения работ (начало-окончание): 01.01.2017 - 31.12.2017

| 1. | Научные результаты проекта. Оценивается полнота и качество выполнения плана научных исследований. |
|-------------|---|
| № п\п | Вопросы/Ответы |
| 1.1 | <p>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; выполнен ли план научных исследований, какие наиболее значимые результаты получены; имеются ли замечания по выполненным исследованиям (необходимо перечислить выявленные недостатки); достигнуты ли цели, и решены ли научные задачи проекта; указывается перечень требуемых доработок, и даются рекомендации по устранению выявленных недостатков (при наличии).</p> |
| | - |
| Комментарии | <p>Завершенный проект направлен на решение проблемы создания новых кристаллических материалов на основе цифровой экспертной материаловедческой системы нового поколения. Развиваемый в проекте подход состоит из 3-х этапов: 1) создание интеллектуальной базы структурных данных, 2) идентификация свойство-формирующих структурных атомных элементов кристаллов, 3) квантово-химический анализ свойств будущих материалов в рамках выбранных структур. Результаты, полученные в ходе выполнения проекта, безусловно, отвечают передовому уровню мировой науки и вносят существенный вклад в решение проблемы создания новых функциональных материалов с заданными свойствами на основе современных теоретических и экспериментальных методов. Результаты проекта востребованы: они используются в большом числе ведущих материаловедческих центров во всем мире, а публикации широко цитируются в международных и российских научных журналах.</p> <p>Намеченный научный план полностью выполнен. Разработаны экспертная система и базы знаний для дизайна новых веществ и материалов с заданной структурой и свойствами. На этой основе осуществлен прогноз новых двумерных материалов, состоящих из координационных полимеров, новых интерметаллидов, цеолитоподобных каркасов, твердых электролитов. Синтезированы 18 координационных полимеров из 206 веществ – кандидатов в потенциальные двумерные материалы, и двух новых интерметаллидов. Получены монокристаллы новых соединений, определена их структура и обнаружены предсказанные 55-атомные кластеры Маккея. Эти результаты вписаны в базы данных. Разработка компонентов экспертной системы продолжается в непрерывном режиме.</p> <p>Экспертная система интегрирована с программой USPEX и применена для прогнозирования топохимических реакций в органических кристаллах. Разработана процедура поиска атомных конфигураций заданной топологии, в том числе, с атомами, связанными невалентными взаимодействиями. Это дало возможность поиска молекулярных ассоциатов, внутри которых могут идти реакции фотодимеризации. Создана основа метода прогнозирования топохимических реакций в органических кристаллах, проведен поиск перспективных веществ для новых светочувствительных материалов.</p> <p>Показано, что разработанная композиционная модель цеолитного каркаса удовлетворительно описывает структуры цеолитов, содержащих темплатные ионы щелочных и щелочноземельных металлов, стабилизирующие первичные строительные единицы. Начата работа по синтезу новых цеолитов. Построена электронная база натуральных строительных единиц, участвующих в сборке цеолитных каркасов, для всех 235 известных типов цеолитов создана база данных топологических схем сборки, описываемых базовыми сетками.</p> <p>Разработанные гибридные топо-квантовомеханические методы применены для прогнозирования новых аллотропов углерода и оценки их физических свойств. Проведены также исследование катодных материалов и анализ кристаллов белков. Найдено, что топология упаковок белковых молекул в значительной степени схожа с упаковками малых органических молекул.</p> <p>Принципиальных замечаний нет. Авторы исправляли свои промахи и недочеты в ходе работы и прислушивались к мнению рецензентов, что похвально. Доработок по проекту не требуется.</p> <p>Проект обеспечил реальный скачок в области применения топологических методов в материаловедении. Создана теоретическая база, проведен синтез реальных материалов, реализовано сотрудничество с лабораториями в РФ и за рубежом, обучены кадры.</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 | <p>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.</p> |
| | - |
| Комментарии | <p>Полученные результаты опубликованы в 32 научных статьях, в том числе в международных журналах самого высокого уровня, таких как Nature (IF 40.137), Accounts of Chemical Research (IF 20.268), Carbon (IF 6.337), Inorganic Chemistry (IF 4.857), Journal of Physical Chemistry C (IF 4.536), Scientific Reports (IF 4.259), Crystal Growth & Design (IF 4.055), Dalton Transactions (IF 4.029), CrystEngComm (IF 3.474) и др. Качество публикаций очень высокое. Количество статей в научных изданиях, входящих в первый квартиль (Q1) научных журналов базы данных Web of Science – 19.</p> <p>За отчетный период члены научного коллектива участвовали в 17 международных и российских научных конференциях, семинарах и симпозиумах по направлению научного исследования. Сделано 7 пленарных/приглашенных и устных докладов, в том числе, ведущим ученым.</p> <p>Членами научного коллектива по направлению научного исследования проведено 11 конференций, симпозиумов, научных семинаров и школ. Ведущий ученый и члены коллектива выступили на них устными и стендовыми докладами.</p> <p>Количество проданных лицензий на разработанное программное обеспечение и базы данных в 2017 г. – 30 (запланировано 26). Количество объектов интеллектуальной собственности, документы об охране которых получены организацией за отчетный период по направлению научного исследования в 2017г. - 4 (запланировано 4). Количество коммерческих договоров/контрактов, полученных и выполненных членами научного коллектива по направлению научного исследования за отчетный период – 4 (план 10). Количество новых пользователей разработанного программного обеспечения и баз данных, которые зарегистрированы на веб-сайте проекта – 613 (план 500).</p> <p>Лаборатория работает в плане публикаций и получения результатов интеллектуальной деятельности весьма продуктивно. Количественные показатели, в целом, выполнены.</p> <p>Ведущий ученый проф. Прозерпио достаточно интенсивно вовлечен в деятельность лаборатории. Очное присутствие ведущего ученого в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарском национальном исследовательском университете имени академика С.П. Королева» (Самарский университет) в 2017 г. для личного руководства лабораторией и проводимыми научными исследованиями составило 203 дня. Это намного превышает требования.</p> |
| 3. | Лаборатория, созданная в рамках проекта. Оцениваются состояние и продуктивность лаборатории: инфраструктура и кадровый состав лаборатории, активность лаборатории в получении финансирования, участие в международных проектах, устойчивость лаборатории. |
| № п\п | Вопросы/Ответы |
| 3.1 | <p>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;</p> |

| | |
|--------------|---|
| | <p>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).</p> |
| | - |
| Комментарии | <p>Научный коллектив, принимавший участие в исследовании в 2017 г., состоял из 36 человек. Из них кандидатов наук 10, в том числе - 11 постоянных сотрудников организации, на базе которой проводятся научные исследования; аспирантов 13, в том числе - 13 обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования; студентов 5, в том числе, 5 обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования. Доля приглашенных из других организаций сотрудников – 0%. Все кандидаты наук являются специалистами с необходимыми компетенциями.</p> <p>Степень вовлеченности сотрудников лаборатории в реализацию проекта, как показывает авторский состав в опубликованных работах, достаточно высока</p> <p>В результате работы по проекту создана инфраструктура вычислительной лаборатории мирового уровня. Имеющееся оборудование и квалификация сотрудников позволили решить все задачи проекта, получить и опубликовать результаты мирового уровня и обеспечить в будущем самостоятельную работу лаборатории.</p> <p>В 2017 г. получено 5 грантов РФФИ и Инновационного фонда Самарской области (план 2) на сумму более 20 000 тыс. руб.</p> <p>Количество и объем выполненных коммерческих договоров (если направление деятельности лаборатории предполагает возможность выполнения таких работ) - нет.</p> <p>Внедрение результатов научной деятельности (коммерческое использование результатов работы, если такие факты имели место); нет</p> <p>За отчетный период заключено 4 лицензионных соглашения.</p> <p>Коллектив лаборатории был вовлечен в 2017 г. в 6 проектов по совместной деятельности в РФ и за рубежом. Они носили характер стажировок сотрудников/аспирантов.</p> <p>Коллектив созданной лаборатории способен 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. Возможные риски, влияющие на устойчивость работы лаборатории, отсутствуют (кроме политических).</p> |
| 4. | Подготовка кадров. Оценивается активность лаборатории в подготовке научных и педагогических кадров, участие в образовательной деятельности. |
| № п\п | Вопросы/Ответы |
| 4.1 | <p>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.</p> |
| | - |
| Комментарии | <p>Принято в аспирантуру/докторантуру в 2017 г. -4 (план 4).</p> <p>Количество кандидатских диссертаций, защищенных сотрудниками лаборатории по заявленному направлению научного исследования – 5 (план 6).</p> <p>Количество докторских диссертаций, защищенных сотрудниками лаборатории по заявленному направлению научного исследования – 2 (план 2).</p> <p>Количество новых образовательных программ (курсов), созданных и внедренных в образовательный процесс членами научного коллектива по направлению научного исследования за отчетный период – 5 (план 2).</p> <p>Дипломированные специалисты и кадры высшей квалификации (научные кадры) из числа членов научного коллектива, подготовленные за отчетный период – 7.</p> |

| | |
|-------------|---|
| | <p>Учебных пособий по тематике проекта не подготовлено. Сайты, освещающие работу лаборатории: http://sctms.ru; http://sacada.sctms.ru; http://topospro.com</p> <p>Организована система подготовки специалистов по топологическим методам и экспертным системам в кристаллохимии и материаловедении (в том числе – дистанционная). Продолжена работа по поддержке интернет-портала по теоретическому материаловедению, организовано четыре научных семинара, две международных научных школы и четыре вебинара по топологическим методам и экспертным системам в кристаллохимии и материаловедении. 166 молодых ученых, специалистов и преподавателей из сторонних организаций прошли профессиональную переподготовку или повышение квалификации в лаборатории по направлению научного исследования в 2017 г. (план 80). 7 членов научного коллектива прошли обучение, переподготовку, повышение квалификации, стажировку по направлению научного исследования за отчетный период в РФ и за рубежом.</p> |
| 5. | Выводы и рекомендации эксперта. |
| № п/п | Вопросы/Ответы |
| 5.1 | <p>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.</p> |
| | - |
| Комментарии | <p>Завершаемый проект обеспечил важный прогресс на пути решения проблемы создания новых кристаллических материалов на основе цифровой экспертной материаловедческой системы нового поколения. Результаты, полученные в ходе выполнения проекта, конструктивны и новы, они отвечают передовому уровню мировой науки и обеспечивают создание целых классов новых функциональных материалов с заданными свойствами на основе современных теоретических и экспериментальных методов. Результаты проекта уже востребованы: они используются в ведущих материаловедческих центрах мира. Публикации лаборатории широко цитируются в международных и российских научных журналах. Проект обеспечил реальный скачок в области применения топологических методов в материаловедении. Создана теоретическая база, проведен синтез реальных материалов, реализовано сотрудничество с лабораториями в РФ и за рубежом, обучены кадры.</p> <p>Полученные результаты опубликованы в научных статьях в международных журналах самого высокого уровня, таких как Nature, Accounts of Chemical Research, Carbon, Inorganic Chemistry, Journal of Physical Chemistry C, Scientific Reports, Crystal Growth & Design, Dalton Transactions, CrystEngComm и др. Качество публикаций очень высокое.</p> <p>За отчетный период члены научного коллектива участвовали в десятках международных и российских научных конференциях, семинарах и симпозиумах по направлению научного исследования. Сделаны десятки пленарных/приглашенных и устных докладов, в том числе, ведущим ученым. По направлению научного исследования проведено более 20 конференций, симпозиумов, научных семинаров и школ. Ведущий ученый и члены коллектива выступили на них устными и стендовыми докладами.</p> <p>Проданы лицензии на разработанное программное обеспечение и базы данных. Имеются объекты интеллектуальной собственности и коммерческие договора. Число пользователей разработанного программного обеспечения и баз данных, которые зарегистрированы на веб-сайте проекта достигло 613.</p> <p>Лаборатория работает в плане публикаций и получения результатов интеллектуальной деятельности весьма продуктивно. Намеченный научный план полностью выполнен. Количественные показатели по проекту, в целом, выполнены.</p> <p>Ведущий ученый проф. Д. Прозерпио был достаточно интенсивно вовлечен в деятельность лаборатории. Очное присутствие ведущего ученого в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарском национальном исследовательском университете имени академика С.П. Королева» (Самарский университет) соответствовало требованиям.</p> <p>Организована система подготовки специалистов по топологическим методам и экспертным системам в кристаллохимии и материаловедении (в том числе – дистанционная). Сотни молодых ученых, специалистов и преподавателей из сторонних организаций прошли профессиональную переподготовку или повышение квалификации в лаборатории по направлению научного исследования. Членов научного коллектива лаборатории прошли обучение, переподготовку, повышение квалификации, стажировку по направлению научного исследования за отчетный период в РФ и за рубежом.</p> <p>Коллектив созданной лаборатории способен 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. Возможные риски, влияющие на устойчивость работы лаборатории, отсутствуют (кроме политических).</p> <p>Недостатки реализации научного исследования и проекта в целом. Принципиальных замечаний нет. Рекомендация: Проект завершен и необходимо подготовить учебник по направлению исследования.</p> |

| | |
|--------------|---|
| 6. | Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ |
| № п\п | Вопросы/Ответы |
| 6.1 | Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ |
| | Исследования по проекту выполнены качественно и в полном объеме |
| Комментарии | Проект завершен очень успешно. Оценка - отлично. |

Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ:

Исследования по проекту выполнены качественно и в полном объеме

Проект завершен очень успешно. Оценка - отлично.

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

Подпись эксперта: _____ (_____)

13 февраля 2018 г.