

Экспертное заключение №2014-14.B25.31.0005-2-002
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)

Что касается экспертной системы, в особенности формально-логической части ("машина вывода"), то оценить объем работы и качество решения задачи на данном этапе, как мне кажется, сейчас не представляется возможным - для этого нужно иметь опыт общения с "живой" системой в непосредственном контакте и на конкретных практических задачах. (Честно говоря, я сомневаюсь, что машинная логика способна превзойти интуицию квалифицированного исследователя. Но если ставится задача избавить его от рутинной работы на предварительном этапе, то это можно только приветствовать).

В отношении работы по систематизации топологий структур молекулярных кристаллов с водородными связями, считаю это направление в высшей степени полезным. Мне, правда, не понятно, почему из числа молекулярных дескрипторов выпала такая фундаментальная характеристика, как симметрия молекулы. Известны эмпирические закономерности распространенности пространственных групп симметрии в молекулярных кристаллах, которые в той или иной степени могут коррелировать с симметрией молекул. (Например, наличие центра симметрии молекулы почти наверняка означает его сохранение и в кристалле.) Что касается свойств материалов, то хотелось бы увидеть возможность поиска корреляций молекулярной структуры и/или топологии с такими важнейшими физическими свойствами, как плотность, температура плавления и теплота сублимации кристалла (которые, на мой взгляд, должны существовать).

В отношении квантовомеханических расчетов оптимальной геометрии кристаллов. Это тяжелая вычислительная задача в смысле затрат машинных ресурсов. Узким местом является наличие хороших стартовых моделей, в то время как топологические модели (позволяя существенно сузить область пространства поиска) таким качеством заведомо не обладают. И здесь я считаю, что в проекте следует уделить большее внимание полуэмпирическим методам, для работы с которыми достаточно персонального компьютера, и которые можно (и нужно!) использовать, по крайней мере, для предварительного тестирования структурных моделей. К тому же эти методы достаточно гибки в плане настройки эмпирических параметров силового поля для повышения точности прогноза в пределах выбранного узкого класса соединений. Причем подобная настройка - решение обратной задачи - в значительной мере опирается на кристаллохимическую информацию, что как нельзя лучше отвечает сути проекта!

В целом же я считаю, что выбранное направление решения задачи прогнозирования материалов кардинально правильным и крайне востребованным в масштабах мировой науки, что отражается в высоких показателях рейтингов журналов. Высказанные замечания имеют частный характер и могут быть устранены в дальнейшей работе.

Затраты на выполнение работ считаю адекватными с учетом инфраструктурного обеспечения, расходов на приобретение высокопроизводительной вычислительной техники, зарубежные поездки и организацию научных мероприятий международного уровня.

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)

Уровень научных публикаций по проекту высокий. Опубликовано 14 статей, в том числе в международных журналах самого высокого уровня: 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). Статья по комплексу программ ToposPro в списке наиболее читаемых статей журнала Crystal Growth & Design.

Свидетельство о госрегистрации объекта интеллектуальной собственности - системы топологических коллекций ToposPro ТТС

Уровень интеграции в отечественное и международное академическое сообщество характеризуют визиты профессоров и кратковременные стажировки аспирантов и постдоков (Россия, Германия, Саудовская Аравия), а также опубликование 12 статей в сотрудничестве с лабораториями других научных учреждений.

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)

Устный доклад одного из членов научного коллектива на международной конференции им. В.А. Фока по квантовой и вычислительной химии в Самаре от коллектива соавторов, трое из которых являются участниками проекта (для двоих основным местом работы которых является российская организация, на базе которой проводится научное исследование)

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)

Кадровый состав в отношении квалификации и возрастного состава считаю оптимальным с учетом того, что коллектив создавался под проект. Коллектив 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, чему в немалой степени способствуют удаленный доступ к электронным ресурсам и коммуникационные возможности сети Интернет.

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

В лаборатории оборудован высокопроизводительный кластер МНИЦТМ (в составе 30 24-ядерных вычислительных узлов, а также многоядерного Nvidia CUDA процессора). Кластер укомплектован пакетами системных программ, компиляторов и специализированного ПО: Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) v5.3.5, Crystal14 v1.0.3, Wien2k v13, GAUSSIAN, LAMPPS, cp2k v2.5.1, SSMP.

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)

Оценки по этому пункту высокие: Участие в организации и проведении XIV конференции им. В.А. Фока по квантовой и вычислительной химии в составе 44 ученых из 11 стран, включая США (в том числе нобелевского лауреата Р.Хофмана), Франции, Германии и Польши. Организация и проведение в Самарском госуниверситете двух научных школ: российской - "Топологические методы в кристаллохимии и материаловедении" (27 участников, гл. обр. молодых) и международной «Topological methods for expert systems in materials science» (20 молодых ученых и профессоров из России, Бразилии, Индии, Китая, Польши и Саудовской Аравии).

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)

Результаты работы заслуживают высокой оценки, особенно это касается числа и уровня научных публикаций, организации научных мероприятий, вовлеченности в международную кооперацию ученых и исследователей. Исследования должны быть продолжены в текущем году при сохранении уровня финансирования. В качестве рекомендации считаю крайне необходимым расширение базы и экспертной системы за счет таких физических свойств кристаллов, как плотность, температура плавления, теплота сублимации (или скрытая теплота плавления), наличие полиморфных модификаций и полиморфных превращений. По моим представлениям, эту работу сделать несложно, поскольку первичная информация имеется в БД STN International (возможно, потребуются лицензионные соглашения. Если их стоимость окажется выше той, которая возможна в рамках настоящего проекта, то изучить этот вопрос и сформулировать предложения на перспективу в окончательном отчете.)

Подпись эксперта: _____ (_____)

16 февраля 2015 г.