

**Экспертное заключение №2015-14.B25.31.0005-3-001**  
по отчетным материалам и результатам работ по итоговому этапу №3  
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.):** 18 600 500,00

**Объем софинансирования отчетного этапа со стороны вуза (руб.):** 7 500 000,00

**Срок исполнения этапа (начало-окончание):** 01.01.2015 - 31.12.2015

<b>Вопросы эксперту</b>
<p><b>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)</b></p>

В отчетный период план научной работы включал "разработку эвристических алгоритмов и процедур расчета физических свойств материалов, исходя из данных о геометрических и топологических свойствах их структур, а также интеграцию алгоритмов и методов геометрико-топологического анализа и квантовомеханического моделирования твердых тел. Указанные алгоритмы и процедуры предполагалось имплементировать в создаваемую экспертную систему и создать вычислительный комплекс, который объединял бы экспертную систему и квантовохимические пакеты и был способен прогнозировать физические свойства материалов различной природы как на качественном, так и на количественном уровне". Должен признать, что оценить объем работ и адекватность затрат на решение поставленной задачи, исходя из представленных в отчете материалов, не представляется возможным. Для этого нужно анализировать конкретные алгоритмы и программы, обладая при этом соответствующей подготовкой и квалификацией, которая в данном случае весьма специфична. Косвенные оценки можно было бы делать, сравнивая с аналогами, но таковые отсутствуют. Можно только констатировать, что подобная интеллектуальная система действительно необходима в логической цепочке "химический состав --> локальная топология структурообразующего блока атомов --> глобальная топология --> кристаллическая структура --> физико-химические свойства твердого вещества". Как и для всякого "черного ящика" (к которым мы относим и все современные пакеты квантовохимических программ) полезность и качество подобной разработки может быть оценено только по прошествии определенного срока ее эксплуатации, включая опыт в среде полностью независимых от разработчика потребителей. Ну а в самом лучшем случае - когда ранее сделанные прогнозы теоретиков начнут проверять и подтверждать практики. Позволю высказать убежденность, что рано или поздно это непременно произойдет.

Несколько замечаний по этому пункту:

В отношении прогнозирования плоскостей спайности молекулярных кристаллов, исходя из соотношения энергий взаимодействия молекул в том или ином направлении слое: идея не нова, но почему-то ранее не получила широкого применения на практике. Возможно, здесь играют немалую роль дефекты кристаллической упаковки: дислокации, плоскости двойникования и т.п.

При анализе топологий органических молекулярных кристаллов следует различать хиральные типы: а именно, является ли вещество чистым энантиомером, представляет собой рацемат (содержит правые и левые молекулы в равной пропорции); или же не является ни тем, ни другим (если точечная группа симметрии молекулы содержит центр инверсии, плоскость зеркального отражения, или инверсионно-поворотную ось). Поскольку в каждом случае действуют свои ограничения на возможные пространственные группы симметрии кристалла, а следовательно, и на его топологию. Так, для энантиомера возможны только энантиомерные группы: P1, P21, P212121, и т.д. Тогда как для рацемата (если не рассматривать случай спонтанного расщепления на энантиомеры) возможны только группы, содержащие центр инверсии, плоскости симметрии и скользящего отражения и поворотные-инверсионные оси. Таким образом, хиральный тип наряду с симметрией молекулы является важнейшим локальным дескриптором, характеризующих химический состав молекулярного кристалла.

Говоря об интеграции своей ИС и зарубежных пакетов квантовохимических программ, неизбежно возникает вопрос, на каких условиях достигнута договоренность с их правообладателями, в особенности если интегрированный продукт предполагается продавать вместе с БД TOPOS.

В этой же плоскости лежит и вопрос о том, в какой степени информация TOPOS может использоваться автономно от баз данных кристаллических структур, которые используются для генерации топологических коллекций? Насколько я понимаю, БД TOPOS не содержит записи кристаллических структур (параметры решетки, группу симметрии кристалла и координаты атомов, а также библиографическую ссылку), которые использованы для получения выборки, но только ссылки на номера соответствующих записей в исходных базах кристаллографических данных.

В исследованиях и разработке новых материалов наибольший интерес вызывает возможность использования теоретических методов модельного расчета для ab initio предсказания кристаллических структур, что дает возможность прогнозирования свойств твердых материалов, структура которых заранее не известна. В особенности там, где природа особых свойств обусловлена дефектами кристаллической упаковки, многофазностью, или неординарными внешними условиями (например, высоким внешним давлением).

В этом отношении следует особо отметить публикацию, в которой содержится пример использования тополого-геометрической аналогии силикатных структур (цеолиты) со структурами тетраэдрического углерода для перечисления новых аллотропов углерода; далее структуры оказалось возможным уточнить путем минимизации полной энергии DFT методом, а затем с помощью того же метода охарактеризовать ряд их физических свойств.

Однако в случае молекулярных кристаллов путь от молекулы к теоретически предсказанной кристаллической структуре неизмеримо сложнее, поскольку требует вычислений потенциальной энергии для огромного числа (десятки и сотни миллионов) пробных конфигураций. В этом плане применение методов топологического анализа может существенно облегчить решение этой достаточно амбициозной задачи.

**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 - вне всякого сомнения - весьма высокий, о чем говорят импакт-факторы международных журналов, в которых опубликованы 6 из 18 статей: Chemical Reviews (IF 46.568), Chemistry A European Journal (IF 5.731), Inorganic Chemistry (IF 4.762), Physical Chemistry Chemical Physics (IF 4.493), CrystEngComm (IF 4.034), Journal of Organometallic Chemistry (IF 2.173).

Уровень интеграции в научное сообщество высокий: об этом свидетельствуют совместные исследования с экспериментальными лабораториями как в России (Москва, Санкт-Петербург, Екатеринбург), так и за рубежом (Технический университет г. Фрайберг, Германия; Миланский университет и университет Милан-Бикокка, Италия), совместные публикации в международных журналах. Важным мероприятием стали организация и проведение в Самаре семинара-совещания рабочей группы ИЮПАК «Топологические представления в координационных сетках, металл-органических структурах и других кристаллических материалах» с участием представителей ИЮПАК, Международного союза кристаллографов, ученых и профессоров из университетов Швеции, США, Италии, Бразилии, Австралии и ЮАР.

**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 российский вуз, на базе которого проводится научное исследование)**

Лекции и приглашенные доклады ведущего ученого и исполнителей проекта в рамках Международного семинара-совещания рабочей группы ИЮПАК «Топологические представления в координационных сетках, металлоорганических структурах и других кристаллических материалах», проведенного в Самаре.

**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 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.

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

В Центре оборудован высокопроизводительный вычислительный кластер, укомплектованный необходимыми пакетами системных программ и компиляторов, а также известных прикладных программ: VASP, Crystal, Wien2k, GAUSSIAN, LAMPPS, SSMP, cp2k; Quantum Espresso; DL\_POLY Classic и CPMD 4.1, позволяющих решать широкий круг задач теоретического моделирования структуры, динамики и физических свойств кристаллов - как на основе методов квантовой теории, так и с применением классических потенциалов и молекулярных силовых полей.

**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)**

По этому пункту оценка самая высокая: Совместно с Комиссией по математической и теоретической кристаллографии Международного союза кристаллографов организована и проведена международная научная школа «Комбинированные топологические и DFT-методы в прогнозировании новых материалов», в которой приняли участие аспиранты и молодые ученые из России, Великобритании, Вьетнама, Германии, Индии, Италии, Южной Кореи. Создана система онлайн-обучения и консультаций по теоретическому материаловедению, в рамках которой проведена серия вебинаров и платных консультаций для российской и англоязычной аудиторий.

**7. Выводы и рекомендации эксперта (дается общее заключение по результатам выполненной работы; делается вывод об организационной и финансовой устойчивости созданной лаборатории, ее способности продолжить свою работу после реализации проекта и выполнять научные исследования, соответствующие мировому уровню)**

Считаю проект весьма успешным. Его главным итогом стало создание при Самарском госуниверситете нового научно-исследовательского центра, ориентированного на разработку средств статистического анализа информации кристаллографических структурных баз данных в целях поиска фундаментальных закономерностей геометрического строения кристаллических веществ на основе топологических методов, формирование и пополнение электронных баз данных (топологических коллекций) для избранных классов химических веществ, перспективных в плане поиска и разработки кристаллических материалов с особыми свойствами. За короткий срок центром подготовлены специалисты соответствующего профиля. Публикации в международных журналах с высоким рейтингом, ряд организационных мероприятий международного уровня, стажировки молодых ученых в зарубежных центрах, вебинары и онлайн-консультации для англоязычной аудитории, реализация базы TOPOS обеспечили хороший старт новому исследовательскому центру на пути завоевания международной известности и авторитета.

В качестве пожелания на ближайшую перспективу хотелось бы еще раз привлечь внимание к ab initio предсказанию структур кристаллов, поскольку Центр располагает необходимыми вычислительными мощностями и компьютерными программами. Тем более, что интерес к этой задаче в последние годы стремительно растет, о чем свидетельствуют не только рост числа публикаций, но и регулярно проводимые Центром структурных данных в Кембридже международные слепые тесты методов предсказания органических кристаллических структур. В этом плане было бы крайне полезно, если бы с инициативой провести аналогичный слепой тест (например, для координационных структур металлов) выступил бы Центр Самарского госуниверситета.

Подпись эксперта: \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_)  
20 февраля 2016 г.