

**Экспертное заключение №2016-14.В25.31.0005-4-002
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	<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; 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).</p>
	-
Комментарии	<p>Данный проект дает конструктивное решение проблемы создания новых кристаллических материалов на основе экспертной материаловедческой системы нового типа. Особенность развиваемого подхода - сочетание интеллектуальной базы структурных данных, поиска существенных структурных атомных элементов кристаллов и квантово-механического моделирования свойств материалов в рамках отобранных структур.</p> <p>Совокупность результатов, полученных в ходе выполнения проекта, можно оценить как отвечающую передовому уровню мировой науки. Результаты вносят существенный вклад в дело оперативного создания новых функциональных неорганических материалов с заданными свойствами на основе современных теоретических и экспериментальных методов. Результаты проекта уже востребованы мировой наукой и используются в ряде ведущих материаловедческих центров в РФ и за рубежом. Результаты исследований хорошо цитируются в международных журналах высокого уровня.</p> <p>План работы на 2016 г. включал разработку алгоритмов для автоматизированного поиска и классификации одно- и двумерных материалов, разработку баз знаний по интерметаллическим соединениям, цеолитным каркасам и органическим темплатам, обновление ранее созданных баз и усовершенствование схемы прогнозирования ионной проводимости в твердых электролитах.</p> <p>План работ выполнен. Наиболее значимые результаты следующие. Созданы алгоритмы и компьютерные процедуры для автоматизированного поиска и классификации одно- и двумерных материалов. Сформирована база данных, содержащая 2676 стержнеупакованных каркасов, проведена классификация стержневых упаковок по топологическим типам базовых сеток каркасов и стержней, собрана информация о координационных свойствах лигандов и мостиковых групп в стержневых упаковках. Созданы базы данных строительных единиц координационных полиядерных кластеров. Проведено исследование свойств соединений из этих баз и прогнозирование новых двумерных материалов на основе координационных полимеров и молекулярных кристаллов и осуществлен синтез 18 соединений.</p> <p>С помощью гибридного тополого-квантово-механического метода осуществлено прогнозирование свойств ионной проводимости потенциальных твердых электролитов, предложена и апробирована усовершенствованная процедура отбора перспективных соединений. Найдено более 500 веществ с потенциально подвижными ионами натрия и калия. Сделан прогноз о возможности существования 28 структур новых аллотропов углерода с энергией, не превышающей энергию алмаза более, чем на 0.36 эВ/атом. Исследованы энергетические, электронные, вибрационные и механические свойства этих аллотропов. Осуществлены разработка и реализация нового универсального алгоритма анализа систем полостей и каналов в пористых кристаллических материалах. Найдены гипотетические цеолитные каркасы, для которых возможно экспериментальное получение. Для быстрого поиска и анализа в базах данных выборка структур с требуемыми геометрическими и топологическими характеристиками разработана программа SACryDes. Продолжена разработка баз знаний экспертной системы, клиента онлайн-сервисов, обеспечивающих удаленный доступ к кристаллографической информации.</p> <p>На мой взгляд, исследования ведутся более широким фронтом, чем предполагалось в исходной заявке. Я понимаю «жадность» исследователей, но это приводит к менее глубокой разработке каждого отдельного вопроса/ направления. Возможно в силу этого, третья ветвь общего плана исследований - квантово-механическое моделирование свойств материалов в рамках отобранных структур – выглядит ослабленной. В частности, проект посвящен кристаллам, а электростатический потенциал как дескриптор взаимодействий, рассмотрен лишь для молекул.</p>

	<p>Проект развивает применение топологических методов в материаловедении, работа идет успешно и сомнений в достижении целей и в позитивном решении научных задач проекта нет. Создана теоретическая база и накоплен опыт сотрудничества с экспериментальными лабораториями для успешного практического использования в 2017 г. разработанной экспертной системы и баз знаний для дизайна новых веществ и материалов с заданной структурой и свойствами.</p> <p>В качестве рекомендаций укажу на необходимость гораздо большего применения квантово-механических методов моделирования свойств для найденных кристаллов. Компьютерные программы, необходимые для этой цели, имеются.</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 13 научных статьях. Из них 2 статьи в Crystal Growth & Design (IF 4.425), 1 статья в CrystEngComm (IF 3.849) и 8 статей в журналах со средними и низкими импакт-факторами. К сожалению, статья в международном журнале очень высокого уровня Angewandte Chemie (IF 11.709) имеет лишь опосредствованное отношение к теме проекта и посвящена научной этике цитирования (название: Homo Citans and Carbon Allotropes: For an Ethics of Citation).</p> <p>Члены коллектива участвовали в 40 международных и российских конференциях. Проведен Международный семинар «Применение топологических методов в материаловедении» (Самара, июль, 2017), где Ведущий ученый и члены коллектива выступили с многочисленными устными и стендовыми докладами. Ведущий ученый также принимал очное участие в конференции «Наука будущего» (г. Казань).</p> <p>Количество проданных лицензий на разработанное программное обеспечение и базы данных в 2016 г. – 4 (запланировано 10).</p> <p>Количество объектов интеллектуальной собственности, документы об охране которых получены организацией за отчетный период по направлению научного исследования в 2016г. - 5 (запланировано 6).</p> <p>Количество коммерческих договоров/контрактов, полученных и выполненных членами научного коллектива по направлению научного исследования за отчетный период - 0 (запланировано 5).</p> <p>Лаборатория работает в плане публикаций и результатов интеллектуальной деятельности достаточно продуктивно, хотя количественные показатели выполняются не всегда. Хотелось бы видеть больше статей в высокоимпактных международных научных журналах.</p> <p>Ведущий ученый Д. Прозерпио достаточно интенсивно вовлечен в деятельность лаборатории и в работу по проекту. Очное присутствие ведущего ученого в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Самарском национальном исследовательском университете имени академика С.П. Королева» (Самарский университет) в 2016 г. для личного руководства лабораторией и проводимым научным исследованием составило 125 дней. Помимо публикаций совместно с членами научного коллектива, ведущий ученый публикуется независимо от других членов лаборатории, см., например, Xian-Dong Zhu, Yong Li, Wei-Xiang Zhou, Rong-Mei Liu, Yu-Jie Ding, Jian Lü, D.M. Proserpio. Metal-organic frameworks assembled from flexible alicyclic carboxylate and bipyridyl ligands for sensing of nitroaromatic explosives. CrystEngComm, 2016, 18, 4530-4537; DOI: 10.1039/C6CE00882H.</p>
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	<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</p>

	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	<p>Научный коллектив, принимавший участие в исследовании в 2016 г., состоял из 36 человек. Из них кандидатов наук 10, в том числе - 10 сотрудников организации, на базе которой проводятся научные исследования; аспирантов 9, в том числе - 9 обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования; студентов 6, в том числе, 6 обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования. Доля приглашенных из других организаций сотрудников – 0%. Все кандидаты наук являются специалистами с необходимыми компетенциями. Степень вовлеченности сотрудников лаборатории в реализацию проекта достаточно высокая, судя по авторскому составу опубликованных работ.</p> <p>На текущий момент в рамках проекта создана инфраструктура вычислительной лаборатории мирового класса. Имеющееся оборудование позволяет решать задачи проекта и обеспечивает дальнейшую самостоятельную работу лаборатории.</p> <p>В 2016 г. получено 5 грантов РФФИ и РФФИ.</p> <p>Количество и объем выполненных коммерческих договоров (если направление деятельности лаборатории предполагает возможность выполнения таких работ) - 0.</p> <p>Внедрение результатов научной деятельности (коммерческое использование результатов работы, если такие факты имели место) - 0.</p> <p>Научные (научно-технические) результаты, внедренные за отчетный период: предоставлены документы о 4 лицензионных соглашениях.</p> <p>Участие лаборатории в научных коллаборациях и международных проектах осуществляется на уровне совместных публикаций</p> <p>Коллектив 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 лаборатории, отсутствуют</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>Количество членов научного коллектива, принятых в аспирантуру и докторантуру по направлению научного исследования, или утвержденных в качестве соискателей ученых степеней за отчетный период – 0 (план 2).</p> <p>Количество кандидатских диссертаций, защищенных сотрудниками лаборатории по заявленному направлению научного исследования – 0 (план 3).</p> <p>Количество докторских диссертаций, защищенных сотрудниками лаборатории по заявленному направлению научного исследования – 0 (план 1).</p> <p>Количество новых образовательных программ (курсов), созданных и внедренных в образовательный процесс членами научного коллектива по направлению научного исследования за отчетный период – 8 (план 2).</p> <p>Учебных пособий в рамках проекта не подготовлено. Сайт, освещающий работу лаборатории: http://sctms.ru; другие интернет-ресурсы: http://sacada.sctms.ru; http://topospro.com</p> <p>За отчетный период по направлению научного исследования членами научного коллектива проведено конференций, симпозиумов, научных семинаров и школ - 2</p> <p>136 молодых ученых, специалистов и преподавателей из сторонних организаций прошли профессиональную переподготовку или повышение квалификации в лаборатории по направлению научного исследования в 2016 г.</p> <p>6 членов научного коллектива прошли обучение, переподготовку, повышение квалификации,</p>

	стажировку по направлению научного исследования за отчетный период в РФ, Италии, Испании и Франции. Члены научного коллектива принимали участие в 10 научных конференциях, семинарах и симпозиумах по направлению научного исследования за отчетный период.
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	<p>Проект дает практическое решение проблемы создания новых кристаллических материалов на основе экспертной материаловедческой системы нового типа. Проект развивает применению топологических методов в материаловедении. Развиваемый подход состоит в сочетании интеллектуальной базы структурных данных, поиске существенных структурных атомных элементов кристаллов и квантово-механическом моделировании свойств материалов в рамках отобранных структур.</p> <p>Создана теоретическая база и накоплен опыт сотрудничества с экспериментальными лабораториями для успешного практического использования разработанной экспертной системы и баз знаний для дизайна новых веществ и материалов с заданной структурой и свойствами.</p> <p>План работы на 2016 г. выполнен. Результаты, полученные в ходе выполнения проекта, отвечают передовому уровню мировой науки и вносят существенный вклад в создание новых функциональных неорганических материалов с заданными свойствами на основе современных теоретических и экспериментальных методов. Они востребованы мировой наукой, используются в ряде ведущих материаловедческих центров в РФ и за рубежом и цитируются в международных журналах высокого уровня.</p> <p>Полученные результаты опубликованы в 13 научных статьях. Из них 2 статьи в Crystal Growth & Design (IF 4.425), 1 статья в CrystEngComm (IF 3.849) и 8 статей в журналах со средними и низкими импакт-факторами. Статья в международном журнале Angewandte Chemie (IF 11.709) имеет опосредствованное отношение к теме проекта (см. выше).</p> <p>Члены научного коллектива, основным местом которых является российский вуз, на базе которого проводится научное исследование, участвовали в 40 международных и российских конференциях. Проведен Международный семинар «Применение топологических методов в материаловедении» (Самара, июль, 2017), где Ведущий ученый и члены коллектива выступили с многочисленными устными и стендовыми докладами. Ведущий ученый также принимал очное участие в конференции «Наука будущего» (г. Казань).</p> <p>Количество проданных лицензий на разработанное программное обеспечение и базы данных в 2016 г. – 4 (план 10).</p> <p>Количество объектов интеллектуальной собственности в 2016г. - 5 (план 6).</p> <p>Количество коммерческих договоров/контрактов, полученных и выполненных членами научного коллектива по направлению научного исследования в 2016г. - 0 (план 5).</p> <p>Таким образом, лаборатория достаточно продуктивна в плане публикаций и результатов интеллектуальной деятельности, хотя количественные показатели выполнены не полностью.</p> <p>Ведущий ученый Д. Прозерпио интенсивно вовлечен в деятельность лаборатории и в работу по проекту. Очное присутствие ведущего ученого в лаборатории в 2016 г. для личного руководства лабораторией и проводимым научным исследованием составило 125 дней. Помимо публикаций совместно с членами научного коллектива, ведущий ученый публикуется и независимо от других членов лаборатории.</p> <p>Научный коллектив, принимавший участие в исследовании в 2016 г., состоял из 36 человек: кандидатов наук 10 (сотрудников организации, на базе которой проводятся научные исследования, 10); аспирантов 9 (обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования 9); студентов 6 (обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования 6). Приглашенных из других организаций сотрудников – 0. Все кандидаты наук являются специалистами с необходимыми компетенциями. Степень вовлеченности сотрудников лаборатории в реализацию проекта высокая.</p> <p>В 2016 г. получено 5 грантов РФФИ и РФФИ, предоставлены документы о 4 лицензионных соглашениях.</p> <p>К 2016 году создана инфраструктура вычислительной лаборатории мирового класса. Имеющееся оборудование позволяет решать задачи проекта и обеспечивает дальнейшую самостоятельную работу лаборатории. Коллектив лаборатории способен решать сложные научные/научно-технические задачи, проводить научные исследования и получать научные результаты мирового уровня после окончания текущей грантовой поддержки, отъезда ведущего ученого и приглашенных из других организаций сотрудников. Возможные риски, влияющие на устойчивость лаборатории, отсутствуют.</p> <p>План по количеству членов научного коллектива, принятых в аспирантуру и докторантуру по направлению научного исследования, или утвержденных в качестве соискателей ученых степеней за отчетный период, числу кандидатских и докторских диссертаций, защищенных сотрудниками лаборатории, не выполнен.</p> <p>Членами научного коллектива по направлению научного исследования за отчетный период создано и внедрено в образовательный процесс 8 (план 2) новых образовательных программ (курсов). Учебных пособий не подготовлено. Сайты, освещающие работу лаборатории: http://sctms.ru;</p>

	<p>http://sacada.sctms.ru; http://topospro.com</p> <p>В 2016 г. по направлению научного исследования членами научного коллектива проведено 2 научные школы. 136 молодых ученых, специалистов и преподавателей из сторонних организаций прошли профессиональную переподготовку или повышение квалификации в лаборатории, 6 членов научного коллектива прошли обучение, переподготовку, повышение квалификации, стажировку за отчетный период в РФ, Италии, Испании и Франции.</p> <p>Члены научного коллектива принимали участие в 10 научных конференциях, семинарах и симпозиумах по направлению научного исследования за отчетный период.</p> <p>Недостатки реализации научного исследования и проекта в целом.</p> <p>Исследования ведутся очень широко, что приводит к менее глубокой разработке каждого отдельного вопроса/ направления. В частности, ветвь общего плана исследований, связанная с квантово-механическим моделированием свойств материалов в рамках отобранных структур – выглядит неубедительно. Отмечу, что проект посвящен кристаллам, а электростатический потенциал как дескриптор взаимодействий, рассмотрен лишь для молекул.</p> <p>Рекомендация: 1) необходимо интенсивно применять квантово-механические методы моделирования свойств для найденных кристаллов. Кроме того, необходимо подготовить больше статей в высокоимпактных международных научных журналах. 2) Необходимо подготовить учебные пособия по разработанным курсам.</p>
--	---

6.	Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ
№ п\п	Вопросы/Ответы
6.1	Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ
	Рекомендуется принять работы по исследованию отчетного этапа без замечаний
Комментарии	Основные недостатки отмечены выше: методологический перекос в сторону чисто топологических методов, неполное выполнение контрольных показателей по защите диссертаций и выпуску учебных пособий; необходимость более интенсивно публиковаться.

Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ:

Рекомендуется принять работы по исследованию отчетного этапа без замечаний

Основные недостатки отмечены выше: методологический перекос в сторону чисто топологических методов, неполное выполнение контрольных показателей по защите диссертаций и выпуску учебных пособий; необходимость более интенсивно публиковаться.

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.