

**Экспертное заключение №2017-14.B25.31.0005-5-002
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	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).
	-
Комментарии	<p>Научные результаты, полученные в ходе выполнения гранта, полностью отвечают указанным в плане работ на 2017 год. На мой взгляд, наиболее значительными представляются следующие результаты:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Синтез новых материалов на основе компьютерного прогнозирования (несмотря на то, что основное направление работы Центра – теоретическое материаловедение). В частности, это синтез интерметаллидов (в сотрудничестве с итальянскими исследователями) и обнаружение кластеров Маккея. 2. Предсказание ростовых характеристик (габитус, дефекты различного типа) кристаллов цеолита. 3. Анализ перспективных катодных материалов $\text{Li}_2\text{CoPO}_4\text{F}$, LiNiO_2, $\text{LiNi}_0.8\text{Co}_0.15\text{Al}_0.05\text{O}_2$ для новых литий-ионных аккумуляторов. 4. Сделана успешная попытка проведения анализа белковых кристаллов с использованием разработанной экспертной системы. 5. Проведена интеграция разработанной коллективом экспертной системы с программным комплексом USPEX, направленным на прогнозирования кристаллических структур. <p>Считаю, что этот перечень важнейших (на мой взгляд) научных результатов коллектива свидетельствует о проведении исследований на мировом уровне (что подтверждается и научными публикациями, см. далее). План научных исследований выполнен полностью, цели и поставленные в проекте задачи решены в полной мере.</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	<p>Формальные сведения: научным коллективом опубликовано (за год) 32 научных статьи, 2/3 из которых выполнено в сотрудничестве с учеными из других институтов. В 13 статьях среди авторов значатся молодые ученые научного коллектива созданного Центра. Необходимо сделать ударение не на количестве опубликованных работ (хотя и эта цифра впечатляет), а на престижности научных изданий, где опубликованы работы. Я отмечу лишь две статьи: первая - «Predicting crystal growth via a unified kinetic three-dimensional partition model», опубликованная в престижнейшем журнале Nature с импакт-фактором IF 40.137 и вторая - «Topology of Intermetallic Structures: From Statistics to Rational Design», опубликованная также в престижном научном издании Accounts of Chemical Research с импакт-фактором IF 20.268.</p> <p>Члены научного коллектива (в том числе и ведущий ученый) активно принимали очное участие в научных мероприятиях по тематике проекта. Всего было сделано 22 выступлений на 10 международных и 7 российских конференциях, из них 4 приглашенных устных доклада, 8 устных и 10 постерных докладов.</p> <p>Необходимо отметить проведение научного семинара в Лаборатории молекулярного моделирования (Федеральный технологический университет, Швейцария) (Д. Прозерпио и Е.В. Александров); в Шанхае (Китай) была проведена международная школа по топологическим методам, экспертным системам и математическому моделированию в кристаллохимии и материаловедении «ToposPro & 13th USPEX Workshop», в которой участвовало 98 человек (студенты, аспиранты, молодые ученые из Китая, России, Германии, Эфиопии, Марокко, Индии, Пакистана, Саудовской Аравии, США, Южной Кореи и Швейцарии). В другом китайском центре - бизнес-инкубаторе TusPark университета Цинхуа была организована и проведена международная научная школа «Topological Methods in Materials Science». В работе школы приняли участие 20 студентов и аспирантов университетов Китая. Наконец отмечу, что сотрудники Центра активно используют современные технологии проведения семинаров, так называемые вебинары. За отчетный период проведено 4 вебинара – из них 3 – на английском языке («New and old ToposPro features, which probably you do not know») и один – для русскоязычной аудитории («Новые и не документированные возможности системы ToposPro-TORIS»). Участниками вебинаров стали 57 человек из 19 стран мира. Материалы вебинаров опубликованы на YouTube. Интеллектуальная собственность защищена свидетельствами о государственной регистрации электронных ресурсов – баз знаний (SACADA и CoMet) и системы онлайн-доступа к базам знаний TORIS. Также направлены заявки на регистрацию трех новых баз данных (DSBU, TTL и CaCh), а также компьютерной программы CFShape.</p> <p>Все вышесказанное позволяет с уверенностью утверждать, что Центр очень продуктивно работает как в плане публикационной активности, так и с точки зрения закрепления приоритетов иной интеллектуальной деятельности.</p> <p>Ведущий ученый Прозерпио Д.М. имеет публикации как совместно с сотрудниками научного коллектива, так и с сотрудниками лаборатории по основному месту работы.</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; 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>Межвузовский научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению при Самарском университете (МНИЦГМ) был организован в рамках проекта с целью анализа и реализации прогностических возможностей разрабатываемой экспертной системы для различных классов химических веществ. Научный коллектив возглавляет известный итальянский ученый Д.Прозерпио из Миланского университета (индекс Хирша 56), есть доктора наук с высокими индексами Хирша, 11 кандидатов наук (все из числа сотрудников организации, на базе которой проводятся научные исследования). Молодые научные сотрудники также представлены в коллективе – 1 докторант (из числа сотрудников организации, на базе которой проводятся научные исследования), 13 аспирантов (из числа обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования), 5 студентов (из числа обучающихся в организации, на базе которой проводятся научные исследования).</p> <p>В научном центре продолжалось развитие инфраструктуры: высокопроизводительный вычислительный</p>

	<p>кластер МНИЦТМ расширен до 54 узлов и 1520 ядер. На сайте МНИЦТМ (по адресу http://sctms.ru) можно ознакомиться со всеми аспектами работы по теоретическому материаловедению в рамках проекта.</p> <p>За отчетный период члены научного коллектива получили поддержку и участвовали в работе грантов Российского научного фонда, Инновационного фонда Самарской области, Российского фонда фундаментальных исследований (3 проекта) на общую сумму 21 330 тыс.руб.</p> <p>В отчетном периоде было заключено 4 договора по возмездной передаче Лицензий на базы данных и компьютерных программ на общую сумму 57 тыс.руб.</p> <p>Вне всякого сомнения, после окончания текущей грантовой поддержки и отъезда ведущего ученого созданный высококвалифицированный научный коллектив способен проводить научные исследования на самом высоком научном уровне, поскольку остается в ведении коллектива созданная инфраструктура и есть в наличии обученные, хорошо подготовленные молодые сотрудники. Основная опасность – в недостаточном бюджетном финансировании научных исследований (общая беда всех научных исследований в России).</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>Участие сотрудников коллектива научного Центра в образовательной деятельности, в подготовке научных и педагогических кадров следует оценить очень высоко, о чем свидетельствуют цифры:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Аспирантов в научном коллективе – 13 2. Студентов в научном коллективе – 5 3. Защищено 2 докторских диссертации по направлению научного исследования 4. Защищено 5 кандидатских диссертаций по направлению научного исследования 5. 4 молодых участников проекта прошли стажировку в других российских и зарубежных лабораториях. 6. Работает информативный сайт МНИЦТМ (по адресу http://sctms.ru), где можно ознакомиться со всеми аспектами работы по теоретическому материаловедению в рамках проекта. 7. По направлению научного исследования членами научного коллектива создано и внедрено в образовательный процесс 5 новых образовательных программ повышения квалификации 8. По направлению научного исследования в МНИЦТМ из сторонних организаций 166 чел. прошли профессиональную переподготовку или повышение квалификации 9. Организовано и проведено две международных научных школы, четыре научных семинара и четыре вебинара по топологическим методам и экспертным системам в кристаллохимии и материаловедении
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>Научный коллектив Центра полностью справился с поставленными на 2017г. научными и организационными задачами.</p> <p>Научные результаты (основные - синтез интерметаллидов и обнаружение кластеров Маккея; предсказание ростовых характеристик кристаллов цеолита; анализ перспективных катодных материалов для новых литий-ионных аккумуляторов; анализ белковых кристаллов), их публикация в престижных научных изданиях, таких как Nature (IF 40.137), Accounts of Chemical Research (IF 20.268) и пр. свидетельствует о работе научного Центра на современном мировом уровне. Всего опубликовано 32 научных статьи, из них 19 опубликованы в журналах, входящих в первый квартиль (Q1) научных журналов базы данных "Сеть науки" (Web of Science)</p> <p>Показатели эффективности выполнения проекта – в большинстве случаев (10 из 14) выполнены или перевыполнены, по оставшимся пунктам сроки выполнения перенесены (по объективным причинам) на 2018г.</p> <p>Научный Центр (лаборатория) имеет все научные и организационные предпосылки для дальнейшей работы на мировом уровне. Необходимо обеспечить финансирование Центра.</p>

	Можно рекомендовать в научном плане более активно развивать работы по компьютерному моделированию материалов, т.е. к квантовохимическим расчетам добавить расчеты с использованием методов молекулярной динамики и Монте-Карло. Это позволит перейти к прогнозированию физических характеристик материалов. Мне кажется, коллективу Центра это по силам.
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	Прекрасная научная работа, связанная с проведением исследований на передовых позициях в области материаловедения. Собран и создан замечательный научный коллектив, включающий молодых ученых, деятельность которых направляют маститые ученые (их заслуги признаны научным сообществом). Надо обязательно сохранить эту Лабораторию и поддержать материально и финансово.

Выводы и рекомендации эксперта по приемке работ:

Исследования по проекту выполнены качественно и в полном объеме

Прекрасная научная работа, связанная с проведением исследований на передовых позициях в области материаловедения. Собран и создан замечательный научный коллектив, включающий молодых ученых, деятельность которых направляют маститые ученые (их заслуги признаны научным сообществом). Надо обязательно сохранить эту Лабораторию и поддержать материально и финансово.

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: _____ (_____)

18 февраля 2018 г.