

Общее заключение,
рекомендации(при
наличии):

План успешно выполняется, результаты работ опубликованы в престижных научных журналах и доложены на престижных научных конференциях. Значимость и объем полученных результатов весьма велики. Можно отметить следующие, наиболее значительные результаты (сохраняю нумерацию из отчета): (1) Сформированы базы данных по 427 444 металл-органическим комплексным соединениям (МОС) (354752 молекулярных (0D), 30020 цепочечных (1D), 20206 слоистых (2D) и 22466 каркасных (3D)), по 313592 гипотетическим цеолитам и по 1677 цеолитоподобных каркасам. По всем структурам получены и сохранены в базах данные о связности атомов, включая невалентные взаимодействия (водородные, специфические и вандер-ваальсовы связи), с учетом трехмерной периодичности структур в виде фактор-графов. Такое представление позволяет полностью восстановить всю трехмерную сетку связей и не имеет аналогов в известных кристаллографических базах данных. (3) Созданы базы данных (коллекции) строительных единиц МОС: коллекции геометрических и топологических характеристик атомов ТТА (843964 записей), лигандов TTL (158415 записей), полиядерных комплексных и кластерных единиц РССDB (3135 записей), а также цеолитов и цеолитоподобных каркасов (370 топологически различных полиэдрических полостей – тайлов). Созданные коллекции размещены на сайте <http://topospro.com>. (8) Найдены «дышащие» металл-органические каркасы, минимальный (E_{\min}) и максимальный (E_{\max}) модули Юнга в которых отличаются друг от друга не менее, чем на порядок. Показано, что анизотропия модуля Юнга, выраженная в отношении E_{\max}/E_{\min} , минимальна для стержневых упаковок с максимальным количеством межстержневых связей. Предложены рекомендации по моделированию адсорбции на «дышащих» каркасах: для них необходимо рассматривать несколько возможных состояний с открытыми и закрытыми порами. Сформирована база знаний по корреляциям между особенностями состава и строения структурных единиц каркаса, его топологией и механическими свойствами. База размещена на сайте <http://sctms.ru> (страница <http://sctms.ru/projects/16-13-10158/>). Кроме того, авторам получен ряд дополнительных результатов, не предусмотренных планом работ, из которых мы перечислим здесь только наиболее интересные: - Разработана компьютерная программа SACryDes, которая обрабатывает информацию в созданных базах данных по металл-органическим каркасам, формирует выборку структур с заданными параметрами локальной топологии связывания структурных единиц и глобальной топологии базовой сетки, осуществляет поиск графа лиганда или молекулы и всех его подграфов, визуализирует граф строительной единицы. - Разработан и программно реализован алгоритм построения двухпериодичных сеток стержневых упаковок координационных полимеров. Созданная на его основе компьютерная процедура автоматически классифицирует тип стержневых упаковок (совокупностей цепочечных координационных группировок). - Разработан и реализован в

комплексе программ ToposPro универсальный метод Domains, позволяющий определять связность (находить межатомные контакты любого типа) в структурах любой природы, в том числе, в координационных полимерах. - Впервые проведена полная топологическая классификация переплетений двухпериодичных координационных сеток с использованием авторского метода сеток Хопфа. Данная классификация поможет в разработке методик синтеза непереплетающихся двухпериодичных координационных полимеров, которые могут выступать в качестве прекурсоров для металл-органических каркасов. - С помощью разработанных программных средств и баз данных создана база данных по 2718 каркасным стержнесодержащим координационным полимерам, которые могут рассматриваться как упаковки стержневидных (цепочечных) структурных единиц. База содержит информацию о базовых сетках каркасов, графах стержней, базовых сетках стержней, и 2D сетках (топологических типах) связности стержней. - Разработаны геометрические и топологические критерии для определения трубчатости цепочечных координационных полимеров и отобрано 118 структур с трубчатой топологией базовых сеток. Найдено 35 металл-органических нанотрубок с доступными для молекул гостей каналами и неперфорированными стенками. - Разработана система топологических критериев, позволяющих отобрать сетки гипотетических цеолитов, имеющие строение, схожее с сетками природных цеолитов. Найдены 57 гипотетических цеолитных каркасов, которые, согласно выработанным критериям, можно рассматривать в качестве потенциальных объектов для синтеза новых цеолитов. План работ, представленный авторами проекта, хорошо обоснован и представляется вполне выполнимым. Хотя в некоторых случаях план, по мнению рецензента, недостаточно конкретизирован и детализирован, в целом представленный авторами план хорошо обоснован и представляется вполне выполнимым.

По мнению рецензента, авторам не следует увлекаться методами "топологического" анализа электронной плотности, которые, на самом деле, не имеют серьезного физического (квантово-механического) обоснования, а основаны на формальном применении методов дифференциальной геометрии к анализу функции электронной плотности. В этих "топологических" методах авторитет хорошей математики (дифференциальной геометрии) скрывает отсутствие квантово-механического смысла используемых построений.

Эксперт 2

Общее заключение, рекомендации(при наличии):

План работы над проектом на 2016 год выполнен, целевые показатели достигнуты. Среди важных результатов выполнения следует отметить следующие: Сформированы базы данных по 427444 металл-органическим комплексным соединениям. С помощью методологии полиэдров Вороного из структурных данных по этим соединениям извлечена информация о их топологических характеристиках. Кроме того коллекция содержит впервые рассчитанные параметры полиэдров Вороного для атомов

МОС и цеолитов: объем атомного домена (полиэдра Вороного), площадь поверхности атомного домена, телесный угол атомов окружения, второй момент инерции атомных доменов и смещение атома из его центра, объем межатомных контактов (сегментов полиэдров Вороного). Были получены дополнительные результаты, не предусмотренные планом работ. В частности, разработана компьютерная программа SACryDes, которая обрабатывает информацию в созданных базах данных по металл-органическим каркасам, формирует выборку структур с заданными параметрами локальной топологии связывания структурных единиц и глобальной топологии базовой сетки, осуществляет поиск графа лиганда или молекулы и всех его подграфов, визуализирует граф строительной единицы, разработан и программно реализован алгоритм построения двухпериодических сеток стержневых упаковок координационных полимеров, разработан и реализован в комплексе программ ToposPro универсальный метод Domains, позволяющий определять связность. Разработаны геометрические и топологические критерии для определения трубчатости цепочечных координационных полимеров и отобрано 118 структур с трубчатой топологией базовых сеток. Найдено 35 металл-органических нанотрубок с доступными для молекул гостей каналами и неперфорированными стенками. Разработана система топологических критериев, позволяющих отобрать сетки гипотетических цеолитов, имеющие строение, схожее с сетками природных цеолитов. Найдены 57 гипотетических цеолитных каркасов, которые, согласно выработанным критериям, можно рассматривать в качестве потенциальных объектов для синтеза новых цеолитов. Полученные результаты опубликованы в двух, как и планировалось, статьях. Однако, ссылка на грант в статье, опубликованной в *Inorganica Chimica Acta* 453 (2016) 704-714 выполнена некорректно, а именно не указано, как это требуется фондом, какая часть работы выполнена с финансовой поддержкой РФФИ, а какая выполнялась за счет финансирования КНР. Опубликованные в этих статьях результаты полностью соответствуют тематике проекта. Предложенный план работы на 2017 год логично продолжает работы, проведенные в 2016 году. Однако, часть, связанная с расчетом геометрических параметров, электронной структуры, распределения электронной плотности, заряда и электростатического потенциала для молекул ароматических соединений (бензол, толуол, пиридин, нафталин) выглядит неубедительно, поскольку такие данные многократно рассчитывались для этих молекул. Финансирование на 2017 год логично и обеспечивает выполнение плана научной деятельности.