

## Эксперт 1

Общее

заключение, [рекомендации\(при наличии\)](#):

Крайне интересный и очень большой по объему работ и разнообразию решаемых проблем проект. Авторами разрабатывается универсальная модель роста кристаллов, что представляется крайне амбициозной и важной для большого числа практических применений задачей. План работ, заявленный авторами, успешно выполняется. Все заявленные работы выполнены, а результаты - получены. Судя по публикациям, авторы участвуют в широком международном сотрудничестве. Результаты работы опубликованы в ведущих международных журналах, включая такие престижные журналы, как Nature и Nature Communications. Заявленный план работы полностью и успешно выполняется. В 2017 году работы были посвящены прогнозированию структур и свойств микропористых материалов (металл-органических соединений и цеолитов) и поиску корреляций «химический состав-структура-свойства» с использованием методов топологического анализа, неэмпирических расчетов (DFT и *ab initio*) и моделирования по методу Монте-Карло. Благодаря использованию созданных на первом этапе проекта ряда уникальных программных средств, реализованных в развиваемого авторами комплексе программ ToposPro (<http://topospro.com>), и сотрудничеству с группами экспериментаторов были выявлены закономерности формирования металлоорганических нанотрубок, металл-органических каркасов на основе стержневых строительных единиц, переплетающихся имидазолатных-карбоксилатных координационных полимеров, цирконий-органических каркасов и цеолитов. Эти закономерности дали возможность прогнозирования возможности получения новых типов нанотрубок и каркасов. Совместные работы с двумя китайскими и одной американской группами экспериментаторов позволили осуществить успешную проверку работоспособности

развиваемых авторами описательных и прогностических методов. Получен ряд новых устойчивых к гидролизу цирконий-содержащих металл-органических соединений, которые могут использоваться в качестве селективных адсорбентов. Найденные корреляции «химический состав-структура» позволили сделать прогноз о возможности синтеза новых координационных полимеров этой группы. Созданы новые базы данных металл-органических соединений и их сорбционных и механических свойств, позволяющие осуществлять поиск оптимальных материалов. Вместе с найденными корреляциями «химический состав-структура-свойства» указанные базы данных формируют первые базы знаний в области химии и кристаллохимии координационных полимеров. Проанализировано распределение электронной плотности и энергия взаимодействий хозяин-гость в серии металл-органических каркасов, чем созданы предпосылки для формулировки новых гибридных топологических-электронных дескрипторов, коррелирующих с селективностью адсорбции. Наиболее значимый результат представляет универсальная математическая модель, разработанная совместно с английскими коллегами и позволяющая воссоздавать форму и дефекты кристаллов химических веществ самой разной природы, в том числе микропористых металл-органических соединений и цеолитов, в заданных термодинамических условиях. Результаты работы опубликованы в журнале Nature (<https://www.nature.com/articles/nature21684>). Реализация проекта приведет к созданию кинетических моделей роста кристаллов, которые могут быть использованы в практической работе как экспериментаторов, так и теоретиков. Успешная работа авторов в 2017 году позволяет быть уверенным в том, что проект будет реализован.

Общее  
заключение, [рекомендации\(при  
наличии\)](#):

В отчетном году основная работа велась по прогнозированию структур и свойств микропористых материалов (металл-органических соединений (МОС) и цеолитов) и поиску корреляций «химический состав-структура-свойства» с использованием методов топологического анализа, расчетов из первых принципов (методом теории функционала плотности и с помощью ab initio-вычислений) и моделирования методом Монте-Карло. Созданные на первом этапе проекта уникальные программные средства, реализованные в авторском комплексе программ ToposPro, позволили выявить закономерности формирования металлоорганических нанотрубок и определенного класса металл-органических каркасов на основе стержневых строительных единиц. Это дало возможность прогнозировать получение новых типов нанотрубок и каркасов. На этом этапе получены серии новых устойчивых к гидролизу цирконий-содержащих МОС, которые могут использоваться в качестве селективных адсорбентов и сделан прогноз о возможности синтеза новых координационных полимеров этой группы. Созданы новые базы данных металл-органических соединений и их сорбционных и механических свойств, позволяющие осуществлять поиск оптимальных материалов. В частности, на основании анализа геометрии пор и каналов выбраны 62 структуры МОС, имеющие доступные для молекулы бензола периодичные системы каналов. Данные структуры могут быть потенциально использованы в качестве адсорбентов для ароматических веществ. Проанализированы механические свойства 23 каркасов, построенных на основе стержневых строительных единиц. Создана база геометрико-топологических характеристик 321 молекул гостей в каркасах 3498 МОС, не содержащих разупорядоченных и неопределённых атомов. В 50 структурах присутствуют молекулы-гости 27 ароматических веществ. Сформирована база

данных по 229 каркасам, построенным на основе ди- или поли-карбоксилатных лигандов, в которых системы пор и каналов доступны для миграции малых молекул. Для определения расположения активных центров сорбции создана программа в среде Python, которая генерирует конфигурации сорбат-сорбент, рассчитывает энергии межмолекулярного взаимодействия и позволяет находить активные центры сорбции. С помощью топологической теории Бэйдера проанализировано распределение электронной плотности и энергия взаимодействий хозяин-гость в серии металл-органических каркасов, что должно позволить сформулировать новые гибридные топологические-электронные дескрипторы, коррелирующие с селективностью адсорбции. Развита универсальная математическая модель, позволяющая в заданных термодинамических условиях воссоздавать форму и дефекты кристаллов химических веществ разной природы, включая изучаемые микропористые МОС и цеолиты. Результаты опубликованы в ведущих научных изданиях с высоким уровнем цитируемости, представлялись на значимых международных и российских научных мероприятиях. Проект следует поддержать, учитывая перспективу его успешного выполнения.