

Эксперт 1

Общее заключение, рекомендации(при наличии):

По мнению Эксперта, проект "Гибридные тополого-квантовохимические методы прогнозирования адсорбционных, каталитических и сенсорных свойств микропористых каркасных и низкоразмерных материалов" вполне успешно реализован. План работ полностью выполнен. Все цели проекта достигнуты, и получены впечатляющие научные результаты. Значимость полученных научных результатов весьма высока. Результаты выполнения проекта были опубликованы в ведущих («топовых») международных научных изданиях с высоким (для соответствующей отрасли) уровнем цитируемости (импакт-фактором): (например, Structural Chemistry (2016 г.), Inorganica Chimica Acta (2016 г.), CrystEngComm (2017 г.), Crystal Growth & Design (2017 г.), Nature (2017 г.), Inorganic Chemistry (2017 г.), Nature Communications (2018 г.), Chemistry of Materials (2018 г.), RSC Advances (2018 г.), Polyhedron (2018 г.), Dalton Transactions (2018 г.), Journal of Luminescence (2018 г.)). В ходе реализации проекта были созданы базы данных и программы для электронных вычислительных машин (программы для ЭВМ): Coordination of Metals (CoMet), Topology Online Research Information System (TORIS), TTL (Topological Types of Ligands), CFSshape, DSBU (Database of Structural Building Units), CaCh (Cavities and Channels). В средствах массовой информации имеются публикации о результатах реализации проекта: <https://indicator.ru/news/2018/04/16/ceolity/>, <https://indicator.ru/news/2018/07/20/cirkonij-organicheskie-karkasy/>, https://www.gazeta.ru/science/news/2018/04/16/n_11420455.shtml, https://www.gazeta.ru/science/news/2018/07/20/n_11817247.shtml. Результаты выполнения проекта были широко представлены на профильных международных научных конференциях. Описание достигнутых результатов в отчете представляется оригинальным и самостоятельным. Отчёт по проекту представляется вполне адекватным и убедительным. В данном проекте использовались передовые методы компьютерного моделирования (методы молекулярной динамики и квантовой химии, комплекс структурно-топологических программ для кристаллохимического анализа ToposPro), а также анализ Кембриджского банка структурных данных, Базы данных неорганических структур, Пирсоновской структурной базы данных и эвристические алгоритмы поиска корреляций между химическим составом соединения, локальными и глобальными топологическими свойствами его кристаллической структуры. Полученные научные результаты полностью соответствуют мировому уровню. Научная новизна результатов исследований, полученных в результате реализации данного проекта, высока.

Эксперт 2

Общее заключение, рекомендации(при наличии):

Описание достигнутых результатов в отчете представляется оригинальным и самостоятельным. В 2018 г. в соответствии с заявленным планом на высоком научном уровне проводилось создание и применение гибридных тополого-квантовохимических методов прогнозирования адсорбционных, каталитических и сенсорных свойств микропористых каркасных и низкоразмерных материалов. Анализ отчета свидетельствует о значительном

прогрессе, достигнутом коллективом за отчетный период. По теме проекта опубликовано 16 статей, в том числе в таких высокорейтинговых журналах как Nature, Cryst. Growth, CrystEngComm. Достигнутые показатели соответствуют заявленным. Все достигнутые результаты всесторонне обнародованы в изданиях и представлены на научных мероприятиях. В целом выполнение проекта можно считать вполне успешным, однако некоторые из результатов исследований 2018 года мне кажутся не столь значимыми. Так авторы указывают, что " Установлено, что плотности кинетической $E(G)$ и потенциальной $E(V)$ энергии электронов в критической точке связи, рассчитанные в модели Бейдера, прямо пропорциональны энергии взаимодействия «сорбат-сорбент» при сорбции органических молекул, в которых отсутствуют активные центры для образования прочных водородных связей." Во-первых, данный результат достаточно хорошо был известен ранее. В частности, в качестве примера можно привести "свежую" док. диссертацию Ю.В. Нелюбиной, в которой анализировалась точность оценки энергии кристаллической решетки в терминах корреляции Эспинозы и ее вариаций . Что касается проблем описания прочных водородных связей, то проблема может быть связана не только и не столько с точностью корреляции, но скорее с ошибкой определения плотностей кинетической и потенциальной энергии в рамках приближения Киржница, которая становится тем больше, чем прочнее рассматриваемое взаимодействие. Также необходимо отметить, что недавно было показано, что лучшим оценщиком взаимодействия является интегральные значения плотностей потенциальной энергии, получаемые интегрирование по межатомной поверхности. Однако, данные замечания носят скорее дискуссионный характер и не снижают в целом положительное впечатление от проделанной работы. . Учитывая объем проведенных исследований, научную и практическую значимость полученных результатов, я считаю, что рассматриваемый отчет заслуживает самой высокой оценки.