

Эксперт 1

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

Описание достигнутых результатов в отчете представляется оригинальным и самостоятельным, автором достигнуты, вообще говоря, уникальные результаты. Заявленный план работ перевыполнен. Результаты опубликованы в ведущих («топовых») научных изданиях с высоким (для соответствующей отрасли) уровнем цитируемости (импакт-фактором). Результаты исследований представлялись на наиболее значимых (определяющих) международных научных мероприятиях, вносящих существенный вклад для развития данной отрасли (1-ая Международная школа по современным пористым материалам, г. Комо (Италия), 17-21 июня 2019 г. Приглашенный доклад, представленный Блатовым В.А., на тему "Методы, программное обеспечение и базы данных для кристаллохимического анализа"; 32-ая Европейская кристаллографическая конференция (ЕСМ32), г. Вена (Австрия), 18-23 августа 2019 г. Постерный доклад, представленный Александровым Е.В., на тему «Кристаллохимические вычислительные инструменты, веб-сервисы, базы данных и подходы для объединения исследователей по всему миру»; XXI Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, г. Санкт-Петербург, 9-13 сентября 2019 г. Устный доклад, представленный Шевченко А.П., на тему «База знаний для дизайна координационных соединений с оксолигандами»; 1-й Международный симпозиум по компьютерному прогнозированию структуры и перспективным материалам (ISCSP&AM), г. Сиань (Китай) 9-12 октября 2019 г. Приглашенный доклад, представленный Блатовым В.А., на тему "Прогнозирование материалов: комбинирование топологического и DFT подходов"; приглашенный доклад, представленный Шевченко А.П., на тему "Прогнозирование структуры координационных соединений

топологическими методами"; Научные чтения, посвящённые 70-летию кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ и 110-летию её основателя член-корреспондента РАН Г. Б. Бокия «Кристаллохимия в пространстве и времени», г. Москва, 29 ноября 2019 г. Пленарный доклад, представленный Блатовым В.А., на тему «Топологические методы и анализ больших данных в кристаллохимии»). Все достигнутые результаты всесторонне обнародованы в изданиях и представлены на научных мероприятиях. План работ по дальнейшей реализации проекта полностью соответствует поставленным задачам, детализирован и конкретен. Выполнение проекта идет с перевыполнением плана, нет сомнений в его успешной реализации. Объем финансирования обоснован и соответствует потребностям и масштабу исследований, рекомендуется финансирование в запрашиваемом объеме.

Эксперт 2

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

В проекте предложен подход к построению универсальных геометрико-топологических моделей для представления надмолекулярной или кристаллической структуры в виде настраиваемых атомных сеток, носящих периодический характер. Для этого были задействованы приемы симплификации структурной топологии. В целом, подход можно назвать успешным, поскольку он позволил систематизировать информацию о возможных реконструктивных фазовых переходах. На этой основе расширен инструментарий развиваемого коллективом программного комплекса ToposPro. Развита процедура настройки параметров силовых полей для быстрой оценки стабильности новых фаз аллотропных модификаций углерода. Авторы заявляют, что ими предсказаны две новые аллотропные модификации углерода, имеющие энергию образования на выше, чем у алмаза.

Проиллюстрированы возможности развиваемых методов на примерах топологически родственных фаз в системах кремнезема и льда. Следует отметить, что из информации, изложенной в отчете не совсем понятно, как именно DFT расчеты позволяют подтвердить или опровергнуть стабильность генерируемых топологических структур. Запланированная модификация метода моделирования и сборки микропористых каркасов реализована на отчетном этапе проекта. Данное направление видится перспективным для моделирования и предсказания структуры цеолитов, в том числе сверхсложных. Авторами расширены базы данных цеолит-подобных структур, являющиеся частью сервисных приложений развиваемого программного обеспечения. Кроме того, обновления коснулись баз данных и коллекций металл-органических каркасных структур и координационных полимеров. Как результат, авторы проекта наблюдали взаимосвязь высокой механической анизотропии в каркасах, вычисляемой на основе модулей Юнга и сдвига, с особенностями организации пористого пространства и ориентацией жестких стержневых групп и лигандов. Проанализированы соотношения между структурными характеристиками и механическими свойствами соединений металл-органических каркасных структур. Разработан алгоритм автоматического поиска двумерных трехпериодических поверхностей в кристаллах, пополнены соответствующие коллекции структур в развиваемом программном комплексе ToposPro.