

Экспертное заключение 1

Обоснование оценки "Степень реализации Проекта" (доступно заявителю, не допускается копирование содержания пунктов, необходимо объяснить сделанный выбор):

Указанные в заявке цели и задачи соответствуют полученным результатам

Обоснование оценки "Научная новизна полученных результатов" (с указанием, в случае возможности, ссылок на литературные и иные источники, текст доступен заявителю):

Созданные в рамках проекта инструменты (базы данных, поисковые алгоритмы и программные средства) позволяют довольно просто оценивать характеристики деформируемости молекулярного каркаса координационного соединения на основе имеющейся информации о его структуре. Этот результат нов и достаточно оригинален, а в будущем может найти применение на практике.

Обоснование оценки "Степень значимости полученных результатов" (доступно заявителю, не допускается копирование содержания пунктов, необходимо объяснить сделанный выбор):

Значимость результатов обусловлена возможностью использования созданных информационных систем для проектирования и разработки новых молекулярных соединений с заданными характеристиками

Обоснование оценки "Уровень полученных результатов" (доступно заявителю, не допускается копирование содержания пунктов, необходимо объяснить сделанный выбор):

Основные результаты проекта представлены к публикации в журнал из 1-го квартиля в БД Scopus в соавторстве с зарубежными коллегами, что является свидетельством их высокого уровня. Вместе с тем, часть результатов опубликована лишь в форме тезисов докладов на международных конференциях.

Обоснование оценки "Степень отражения результатов в публикациях" (доступно заявителю, не допускается копирование содержания пунктов, необходимо объяснить сделанный выбор):

См. пояснение в предыдущем пункте.

Заключительные замечания эксперта по Отчету: (Ваши замечания будут доступны заявителю.)

В целом проект оцениваю положительно. Результаты работы могут быть полезны для специалистов в области квантовохимического моделирования и проектирования устройств молекулярной электроники.