

## **Экспертное заключение по отчетным материалам и результатам работ за 2018 год**

Грант РНФ 18-73-10116

### **Эксперт 1**

Общее заключение, рекомендации (при наличии): Данный проект посвящён исследованию и усовершенствованию методов анализа данных, касающихся строения кристаллических веществ, а также созданию баз знаний о физико-химических свойствах материалов. В результате реализации проекта станет возможно прогнозировать пути получения новых координационных полимеров, их строения и свойств. Из анализа отчёта следует, что проект выполняется успешно и в целом выполненные работы соответствуют заявленному плану. За первый год выполнения проекта была опубликована одна статья в журнале первого квартала, что полностью соответствует плану по публикациям за первый год выполнения гранта. Также из заявки следует, что в будущем году предполагается опубликовать ряд статей в высокорейтинговых журналах с результатами исследований, выполненными по теме гранта. С научной точки зрения эксперт не видит каких-либо препятствий для успешной реализации проекта. Тем не менее, эксперт полагает, что следует обратить внимание совета фонда на ряд моментов: 1) В пункте 2.15, касающемся публикации за первый год, необходимо было дать пояснения о том, какие работы выполнялись не за счёт данного гранта так, как это отражено в публикации. Руководителем гранта не было выполнено это условие, так как в отличие от отчёта в статье отсутствуют какие-либо пояснения о том, какие конкретно работы финансировались из грантов со стороны Китая: «The authors gratefully acknowledge the financial support for this work from the National Natural Science Foundation of China...». С формальной точки зрения это свидетельствует о том, что за счёт трёх грантов со стороны Китая финансировалась вся работа, включая и ту часть, которая финансировалась из средств РНФ, что потенциально свидетельствует о двойном (в данном случае многократном) финансировании одного и того же вида работ. 2) Данный грант реализуется в рамках Президентской программы и выдан для «проведения исследований научными группами под руководством молодых учёных». В заявке на грант в прошлом году был указан конкретный состав исполнителей из 8 человек, однако фактически ни в отчётной публикации, ни в тех публикациях, которые запланированы на следующий год (кроме одной), никто из членов коллектива, кроме руководителя гранта не фигурирует: доминантой являются авторы из Китая, работающие под руководством своего собственного руководителя. Более того, та одна из статей, которая кроме руководителя содержит иных исполнителей по гранту РНФ, включает лишь ещё одного исполнителя гранта. В связи с этим, эксперт полагает, что с административной точки зрения грант развивается не в том русле, которое

предполагает Президентская программа. Подводя итог, эксперт полагает, что с точки зрения научной составляющей успешная реализация проекта не вызывает никаких сомнений, однако административные нюансы реализации вызывают серьезные вопросы, которые следует учесть при принятии решения о продолжении финансирования.

## **Эксперт 2**

Общее заключение, рекомендации (при наличии): По заявке на Проект "Методы топологического дизайна координационных полимеров" планировались в отчетном году следующие исследования: - Создание баз данных диспергируемых в наночастицы, наностержни, нанотрубки, и наночешуйки координационных полимеров и данных проводников первого рода и проводников второго рода (протонные и катионные) среди координационных полимеров. - Расчет электронной структуры и характеристик координационных полимеров. Предсказание возможности получения новых координационных полимеров на основе выявленных ранее корреляций. - Пополнение базы знаний корреляциями между электронными характеристиками, структурными дескрипторами и электропроводящими свойствами координационных полимеров. - Выявление изотипных, изомерных и полиморфных форм координационных полимеров, используя базу данных координационных полимеров. - синтез новых кристаллических координационных полимеров: анализ структуры кристаллов в ИНЭОС РАН, СПбГУ, КФУ, МИЭТ. К сожалению, данный план работы по форме фактически повторяет планы других проектов РНФ и РФФИ, выполняемыми группами из большого коллектива Самарского государственного технического университета, работающего по развитию и внедрению автоматизированной системы кристаллохимического анализа ToposPro. Отличия состоят в круге объектов. Какой из таких проектов оригинальный, насколько они самостоятельны, определить по имеющемуся отчету трудно. Безусловно, это большой минус проекта. С формальных позиций все исследования выполнены. Идет создание баз данных диспергируемых в наночастицы, наностержни, нанотрубки, и наночешуйки координационных полимеров, данных проводников первого рода среди координационных полимеров и проводников второго рода (протонные и катионные) среди координационных полимеров. Рассмотрена возможность получения новых координационных полимеров на основе выявленных ранее корреляций. Проведены расчеты электронной структуры и характеристик координационных полимеров. Пополнена база знаний корреляциями между электронными характеристиками, структурными дескрипторами и электропроводящими свойствами координационных полимеров. Выявлены изотипные, изомерные и полиморфные формы координационных полимеров в базе данных координационных полимеров. Полученные результаты носят характер технологический и инженерный знаний. Их научная новизна ограничена. За

отчетный период опубликована 1 статья: Sun Y. , Chen X., Wang F., Ma R., Guo X., Sun S., Guo H., Alexandrov E.V. Variation of Topologies and Entanglements in Metal-Organic Frameworks with mixed tris[4-(1H-imidazol-1-yl)phenyl]phosphine oxide and dicarboxylate ligands. Dalton Transactions (Q1); DOI 10.1039/C9DT00249A В состав ее авторов лишь 1 человек из членов коллектива данного проекта. У остальных статей нет. Ход работы по проекту осуществляется в строгом соответствии с заявленным планом, обеспечивающим его успешную реализацию. Однако необходимо привести его в соответствие с требованиями РФФИ: указать оригинальность проекта, явно выписать отличие от аналогичных проектов. Усилить научную составляющую и увеличить публикационную активность. Статьи должны быть у всех основных членов коллектива. Тогда проект имеет перспективу выполнения.