

# РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРТИЗЫ ОТЧЁТА ПО ПРОЕКТУ №18-73-10116 ЗА 2019 ГОД

**Руководитель:** Александров Евгений Викторович

**Название:** Методы топологического дизайна координационных полимеров

---

## Эксперт 1

Общее заключение, рекомендации(при наличии):

Данный проект направлен на разработку методов топологического дизайна координационных полимеров на основе сложных современных алгоритмов с последующим анализом атомной и электронной структуры выбранных объектов квантово-химическими методами. Идет поиск структурных критериев определяющих электронную и ионную проводимость координационных полимеров. Результаты исследований должны пополнить соответствующие базы знаний. Подход представляется оригинальным. Описание достигнутых результатов в отчете позволяет заключить, что фактический план работ выполнен полностью. С помощью деревьев решений и/или нейронной сети установлены структурные и энергетические дескрипторы для моделей новых координационных полимеров. Разработана химико-топологическая модель декомпозиции полимерных мотивов, способная обнаруживать стабильные подсетки, связанные слабыми взаимодействиями. Для новой выборки найдены структурные критерии, определяющие электронную и ионную проводимость координационных полимеров. Обновлено базы знаний по электропроводящим свойствам координационных полимеров. Синтезировано 6 образцов новых кристаллических координационных полимеров. Полученные результаты дополняют существующие представления о корреляциях между электронными и структурными характеристиками и электропроводящими свойствами координационных полимеров. Достигнут высокий уровень планирования актуальных инженерных задач. Результаты опубликованы в научных изданиях высокого уровня (Q1 и Q2) и доложены на представительных конференциях. 1. Guo M., Wang F., Ma R., Guo X., Sun S., Sun Y., Liu S., Guo H., Alexandrov E. V. Two novel self-catenated metal-organic frameworks with large accessible channels obtained by mixed-ligand strategy: adsorption of dichromate and Ln<sup>3+</sup>-post synthetic modification *Crystal Growth & Design* (2019 г.) Q1 2. Xie L.S., Skorupskii G., Alexandrov E.V., Proserpio D.M., Dincă M. Diverse  $\pi$ - $\pi$  stacking motifs modulate electrical conductivity in tetrathiafulvalene-based metal-organic frameworks *Chemical Science* (2019 г.) Q1 3. Ma R., Guo X., Sun Y., Wang F., Sun S., Zhou T., Liu S., Guo H., Alexandrov E. V. Assembly of two novel self-catenated metal-organic frameworks from a tripodal N, O-donor ligand: syntheses, structures and properties *Inorganica Chimica Acta* (2019 г.) 4. Jiang X., Cui X., Duncan A.J.E., Li L., Hughes R.P., Staples R.J., Wu Y., Proserpio D.M., Alexandrov E.V., Ke C. Topochemical Synthesis of Single-Crystalline Hydrogen-bonded Crosslinked Organic Frameworks and Their Guest-induced Elastic Expansion *Journal of the American Chemical Society* (2019 г.) Q1 5. Yu-Lin Li, Eugeny V. Alexandrov, Qi Yin, Lan Li, Zhi-Bin Fang, Wenbing Yuan, Davide M. Proserpio, Tian-Fu Liu. Record Complexity in the Polycatenation of Three Porous Hydrogen-Bonded Organic Frameworks with Stepwise Adsorption Behaviors *Journal of the American Chemical Society* (2020 г. Q1 На следующий год, в соответствии с общим планом, запланированы следующие исследования: - Предсказание и экспериментальная проверка трансформации в наносистемы. - Создание и тестирование многоуровневой топологической модели самосборки полимерных мотивов. - Отбор координационных полимеров с потенциально высокой электронной и ионной проводимостью. Анализ их электронной структуры. - Пополнение базы знаний корреляциями между электронными и структурными характеристиками и электропроводящими свойствами

координационных полимеров. Рисков невыполнения проекта нет. Критика. В публикациях участвует очень большое число иностранных соавторов, не входящих в коллектив. Личный вклад соавторов в отчете не указан.

Следует обосновать выбор функционала в ТПФ расчетах.

## Эксперт 2

Общее заключение, рекомендации(при наличии):

Проект, выполняемый под руководством Е.В. Александра, направлен на разработку топологического дизайна металл-органических координационных полимеров (МОКП). Изучение МОКП является «горячим» направлением в современной химии и в науках о материалах. Исследования чрезвычайно интенсивно развиваются в мировой науке. Самарская школа занимает свое самостоятельное, важное и общепризнанное место в таких исследованиях, прежде всего благодаря развитию топологических методов исследования, направленных на предсказание новых структур и, самое важное, их функциональных свойств. Исследования по рецензируемому проекту выполнялись в соответствии с пунктами плана работ на отчетный год. Разработанные ранее теоретические подходы были развиты, что позволило перейти к поиску новых структур, обладающих высокой электронной или ионной проводимостью. Для этого разработан специальный алгоритм. Для ряда предсказанных структур следует ожидать очень низкое значение ширины запрещенной зоны, и это означает, что такие пока гипотетические вещества могут обладать высокой электронной проводимостью. В самостоятельных экспериментальных исследованиях предприняты попытки получения МОКП на основе способных к окислению лигандов с полифенольными группами. Однако, значительных успехов в экспериментах по получению и полной характеристике таких соединений, пока не достигнуто. Разработан также специальный алгоритм выбора соединений из базы структурных данных CSD для диспергирования. Проведены эксперименты для подтверждения предсказательной силы разрабатываемого подхода, однако и здесь пока нет однозначных результатов. По результатам работы опубликовано 5 статей, четыре из них в журналах первого квартала. Отметим две статьи в топовых журналах JACS (x2) и Chem. Sci. Это очень высокий показатель. Однако, необходимо особенно отметить, что все эти статьи опубликованы в сотрудничестве с сильными зарубежными группами, а руководитель проекта является единственным автором в этих статьях из участников проекта. Каждая статья содержит несколько благодарностей зарубежным фондам, а также благодарность РФФИ за финансовую поддержку развития топологических методов анализа. Оцениваю вклад руководителя проекта РФФИ в эти статьи как важный, но далеко не определяющий. План работы на следующий год написан в соответствии с общим планом работы над проектом и с учетом полученных ранее результатов. Однако план составлен исключительно кратко, не выделены те проблемы и трудности, которые могут возникнуть при его выполнении. Финансовые траты на следующий год хорошо обоснованы. Финансирование 5000 тыс. рублей планируется в значительной степени израсходовать на вознаграждение членов научного коллектива и вспомогательного персонала. Планируется закупка ИК спектрофотометра, другого более мелкого оборудования и химических реактивов. Запланировано участие в работе ряда конференций высокого уровня, а также поездки в ИНЭОС РАН для выполнения совместных исследований. Таким образом, проект РФФИ, в целом, успешно выполняется.