

Эксперт 1

Общее заключение,
рекомендации(при
наличии):

Основная задача Проекта РФФ «Теория, методы моделирования и направленный поиск новых высоковалентных ионных проводников методами кристаллохимического анализа и квантово-механического моделирования», способствующего решению актуальной проблемы поиска эффективных проводящих материалов для современных систем хранения энергии, заключалась в изучении возможных механизмов ионной проводимости в кристаллах, формулировке закономерностей, определяющих ионную проводимость, и поиску на их основе новых перспективных высоковалентных ионных проводников. Для решения указанной задачи в отчетном периоде научным коллективом Проекта проанализированы литературные данные по известным оксидным и халькогенидным высоковалентным ионным проводникам с проводимостью по ионам Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Al^{3+} , Zn^{2+} и определены пороговые критерии проводимости для высоковалентных ионов. Для ряда новых потенциальных высоковалентных ионных проводников, обнаруженных с помощью разработанных в ходе выполнения Проекта алгоритмов автоматического поиска, также проведено квантово-механическое моделирование путей миграции катионов. Это позволило научному коллективу выполнить все запланированные на отчетный период работы и получить соответствующие результаты. Среди них особенно хотелось бы отметить обнаруженное авторами хорошее согласие модельных предсказаний о статистике энергетически выгодных/затрудненных переходов с экспериментальными данными. Показатели публикационной активности, достигнутые по результатам выполнения Проекта в отчетном периоде, формально соответствуют заявленным, так как включают две научные статьи, опубликованные в журналах, относящихся к первому квартилю (Q1). Однако в одной из них отсутствует ссылка на организацию, через которую осуществляется финансирование Проекта, что не является нарушением, если данная работа была выполнена в рамках оказания услуг сторонними организациями. В таком случае научному коллективу стоило бы это отметить в разделе «Благодарности» соответствующей статьи. С другой стороны, полученные научным коллективом результаты активно представлялись на российских и международных конференциях в виде большого числа устных докладов. Запланированные на следующий год работы, подробно описанные в соответствующем разделе представленного отчета, являются логическим продолжением исследований, проведенных научным коллективом в отчетном периоде. Запрашиваемый на следующий год объем финансирования в принципе соответствует целям и задачам Проекта. Основными статьями расходов являются вознаграждение членов научного коллектива и приобретение оборудования для поддержания работоспособности вычислительного кластера МНИЦТМ. Стоит, однако, отметить, что необходимость приобретения данного дорогостоящего оборудования (стоимостью 900 тыс. руб.) в отчете не обоснована. Несмотря на указанные замечания, которые, надеюсь, члены научного коллектива учтут в ходе следующего этапа выполнения

Проекта, его финансирование может быть продолжено.

Эксперт 2

Активное развитие мобильных средств связи, электромобилей и других автономных электронных устройств требует постоянного совершенствования эксплуатационных характеристик источников питания и снижения их стоимости. Главной задачей данного проекта является поиск новых материалов, пригодных для создания будущих поколений аккумуляторов, что лежит в русле реализации Стратегии НТР РФ по направлению, связанному с переходом к новым материалам. Для решения поставленной в проекте задачи планируется использование методов кристаллохимии, квантово-механического моделирования и машинного обучения, лежащих в основе разрабатываемого исполнителями подхода к поиску ион-проводящих материалов. За отчетный период исполнителями проведена большая работа: выявлены критерии, которым должны удовлетворять каналы и пустоты для реализации возможности высоковалентной ионной проводимости в кристаллах. С использованием найденных критериев созданы алгоритмы автоматического поиска новых потенциальных высоковалентных ионных проводников. Кристаллохимический скрининг с использованием созданных алгоритмов позволил предсказать 124 потенциальных высоковалентных ионных проводника с проводимостью по ионам Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Al^{3+} и Zn^{2+} . Для наиболее перспективных из предсказанных потенциальных твердых электролитов с использованием методов теории функционала плотности и упругой эластичной ленты вычислены энергетические характеристики диффузии. Установлено, что размеры каналов проводимости бета модификаций феррита и алюмината натрия изменяются симбатно с возрастанием ионной электропроводности. Разработан комбинированный подход к моделированию ионного транспорта в разупорядоченных/легированных электролитах, основанный на квантово-механическом моделировании и машинном обучении. Исполнителями проекта создан и поддерживается сайт, на котором отражается информация по известным и спрогнозированным ими высоковалентным ионным проводникам (<https://batterymaterials.info>). Результаты исследований широко представлены на профильных научных конференциях, послужили основой двух статей, опубликованных в журналах из первого квартала. К сожалению, в одной из статей отсутствует ссылка на организацию, в которой выполняется проект, что по правилам РНФ не позволяет её учитывать в публикационных показателях реализации проекта. Можно предположить, что вследствие опечатки напротив фамилии соавтора-исполнителя проекта стоит название другого вуза. Это легко изменить посредством направления в редакцию соответствующего исправления (corrigendum). В противном случае для успешного выполнения плановых показателей потребуется публикация дополнительной статьи. План работ на следующий этап полностью согласуется с задачами проекта, хорошо структурирован и даёт детальное представление об предстоящих исследованиях. В соответствии с ним ожидается разработка и тестирование

Общее заключение, рекомендации(при наличии):

геометрико-топологических алгоритмов прогнозирования высоковалентных анионных проводников на объектах, для которых у авторов имеются результаты квантово-химического моделирования. Ожидается выявление взаимосвязей между геометрическими характеристиками структуры кристалла и параметрами ионной диффузии, а также оценка влияния различных типов дефектов в кристаллах на ионную проводимость. Запланированные на следующий этап расходы обоснованы и полностью соответствуют задачам проекта. Анализ отчетных материалов и публикаций по проекту внушают уверенность, что коллектив исполнителей способен достичь заявленных результатов.