

Заключение экспертного совета

По результатам экспертизы, в том числе с учетом мнения экспертов*, Экспертный совет РНФ по Президентской программе исследовательских проектов считает, что проект **реализован успешно**, все заявленные работы выполнены или заменены равнозначными (причём необходимость замены убедительно мотивирована в отчёте), планируемые показатели эффективности работы по проекту в части обнародования результатов достигнуты.

**Члены Экспертного совета не всегда разделяют все суждения экспертов, но именно наличие разных суждений позволяет Экспертному совету сформировать свое коллегиальное мнение о результатах экспертизы реализации проекта.*

Эксперт 1

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

Развитие современных технологий и планируемый переход к "зеленой энергетике", предполагающий отказ в авиационной и автомобильной промышленности от двигателей, работающих на ископаемом топливе, требуют создания новых типов аккумуляторов, обеспечивающих более высокие эксплуатационные характеристики и низкую стоимость по сравнению с современными аналогичными устройствами. Основной целью проекта является поиск новых материалов, пригодных для создания будущих поколений аккумуляторных систем. Для её достижения планируется разработка подходов к моделированию высоковалентных ионных проводников с использованием скрининга баз данных, кристаллохимического анализа и квантово-химического моделирования, дополненного машинным обучением. На завершающем этапе проекта планировалось продолжить квантово-механические расчеты свойств наиболее перспективных соединений, оценить с использованием теоретических исследований влияние разупорядочения/дефектов в кристаллах на ионную проводимость. Полученные результаты будут заноситься в базу данных рассчитанных физических параметров и использоваться для установления корреляций «состав-структура-свойства» и состав-дефекты-структура-свойства» при помощи техники машинного обучения. В соответствии с планом работ посредством использования комплексного подхода, включающего геометрико-топологический анализ, методы валентных усилий связи и теории функционала плотности предсказана ионная проводимость в халькоген-содержащих структурах с высоковалентными катионами Mg²⁺, Ca²⁺, Al³⁺. Изучение структур с рабочими ионом Al³⁺ позволило выявить перспективные соединения с энергиями миграции иона металла, не превышающими 1 эВ. Выполненная за отчетный период модификация алгоритмов работы скрипта PATHFINDER привела к улучшению качества прогнозирования путей

ионной диффузии в исследуемых структурах. Успешно развиваемая коллективом база данных batteryaterials.info (размещённая в сети Интернет) дополнена информацией о более чем 700 кристаллических ионных проводниках, многие из которых имеют хороший потенциал использования при создании новых высоковалентных металл-ионных аккумуляторов. Анализ полученных в ходе выполнения проекта данных позволил выявить ряд закономерностей, связывающих состав/структуру изученных систем с полезными свойствами. Так установлено, что повышению ионной проводимости способствует увеличение поляризуемости каркасного иона и уменьшение его электроотрицательности. Аналогичное влияние на целевую характеристику (ионную проводимость) оказывает эффект разупорядочения подрешетки рабочего иона. С использованием результатов теоретических исследований синтезирован ряд образцов, обладающих, согласно расчётам, свойствами цинк-ионных проводников, которые в дальнейшем планируется использовать в качестве катодов цинк-ионных аккумуляторов. Следует отметить приложенный к отчёту иллюстративный материал, хорошо дополняющий описание проведённых работ, результаты которых полно отражены в периодической печати, план по публикациям за отчётный период и за весь проект перевыполнен. Можно заключить, что проведённые в ходе реализации проекта исследования будут способствовать ускорению создания новых типов высокотехнологичных аккумуляторов, эксплуатационные характеристики которых, способны превышать имеющиеся у современных литий-ионных источников тока, что полностью согласуется со Стратегией научно-технологического развития РФ в части перехода к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования.

Эксперт 2

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

Проект безусловно можно считать успешным. Заявленный план работ перевыполнен. При этом работа по тематике проекта не исчерпана и может быть продолжена в рамках следующего гранта (продление). Полученные научные результаты превосходят заявленные. В ходе выполнения проекта получены значимые научные результаты для развития теоретического материаловедения - поиска/предсказания/описания новых проводников с помощью кристаллохимических и квантовохимических методов. Результаты опубликованы в известных научных изданиях с уровнем цитируемости (импакт-фактором)

выше среднего для данной отрасли. Все представленные публикации полностью соответствуют тематике проекта. Работа над всеми публикациями выполнена в коллаборации с другими научными группами, в списке благодарностей всегда присутствуют иные источники финансирования, в частности и в рамках одной организации без описания вклада в общую деятельность (например, финансирование РФФИ аспиранты идет параллельно в двух представленных публикациях). Можно пожелать руководителю и участникам проекта побольше своих самостоятельных публикаций, где как топологические/кристаллохимические подходы, так и DFT-расчеты будут играть ключевую роль, являться драйверами исследования, а не просто "поддерживать" и/или дополнительно описывать результаты. Заявленные показатели по публикациям существенно превышены, однако можно выделить лишь две статьи, почти на 100% представленные результатами данного проекта. Остальные публикации лишь инкрементально отражают результаты работ по проекту, в основном дополнительное DFT-описание полученных экспериментальных результатов. Тем не менее, можно констатировать, что заявленный план работ полностью выполнен, по отдельным направлениям перевыполнен. Работа по проекту представлена на различных научных мероприятиях (конференциях и школах молодых ученых) в виде устных и стендовых докладов. Участники проекта получили награды за эффективное участие в работе школ-конференций. Несмотря на то, что на третьем году проекта из состава были исключены двое научных сотрудников, произведенные замены исполнителей не изменили существенно профессиональный уровень коллектива, о чем свидетельствуют опубликованные работы с нововведенными участниками. В рамках проекта разработана и поддерживается база данных материалов для аккумуляторов batteryaterials.info - будущий конкурент существующему американскому проекту MaterialsProject. Критически важно развивать такие базы знаний, что будет полезно как для теоретиков, так и для экспериментаторов в области дизайна и разработки новых материалов с улучшенными свойствами. Полученные научные результаты вносят существенный вклад в решение задач направления из Стратегии НТР РФ "Переход к передовым цифровым, интеллектуальным производственным технологиям, роботизированным системам, новым материалам и способам конструирования, создание систем обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта", особенно в части создания систем интеграции и обработки данных, позволяющих в будущем рационализировать поиск и предсказание

новых материалов. Считаю необходимым поддержать отчет и пожелать руководителю и участникам дальнейших успехов.