

Эксперт 1

Описание достигнутых результатов в отчет является оригинальным, авторским, прослеживается стиль и "почерк" руководителя. Заявленный план работ выполнен в полном объеме по отдельным пунктам представлены дополнительные результаты. Все запланированные работы выполнены. В ходе выполнения проекта получены важные системно-значимые результаты в области геометрико-топологического анализа потенциальных магний/кальций/цинк/алюминий-ионных проводников. Проведены скрининги баз данных с последующими более детальной теоретической характеристикой и синтезом отдельных представителей. Получил развитие алгоритм автоматического поиска путей ионной диффузии в кристаллах Pathfinder. Продолжается наполнение базы данных проводников. Результаты опубликованы в виде двух статей, одна из них в известном научном издании с уровнем цитируемости выше среднего (J. Phys. Chem. C), вторая в журнале Processes (MDPI). А также представлены в виде докладов научных конференций (тезисы). Дополнительно результаты работ представлены на 11 (!) конференциях всероссийского и международного масштабов в виде устных и стендовых докладов. Нельзя не отметить, что руководитель проекта выступил с пленарным докладом на одной из школ-конференций, что отражает научную значимость выполняемых работ и полученных результатов. Результаты работ также опубликованы в СМИ. В отчетном периоде произошла замена основного исполнителя, что никоим образом не повлияло на качество и результаты работ. Хотелось бы отметить, что благодаря замене исполнителя увеличилась доля молодых ученых в коллективе проекта. Заявленные показатели на первый год выполнения проекта по публикациям превышены. Опубликована статья в Q1, а также статья в журнале Q2. Выполнение проекта идет с перевыполнением плана, нет сомнений в его успешной реализации. В качестве замечания хотелось бы порекомендовать прикладывать к отчету файл с иллюстрациями по результатам. В частности, интересно было бы более подробно узнать про синтез и исследование кислород-ионной проводимости в ряде оксимолибдатов Ln_2MoO_6 ($\text{Ln} = \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Dy}$). Такой файл позволит подтвердить те результаты работ, по которым в отчетном периоде не было публикаций или научных выступлений. План работ на будущий год полностью соответствует поставленным задачам, детализирован и конкретен. Рекомендую поддержать отчет и продолжить финансирование проекта. Нет сомнений в его успешной реализации.

Эксперт 2

Настоящий проект посвящен созданию методов теоретического моделирования материалов, способных послужить основой новых типов металл-ионных аккумуляторов. В ходе его реализации будет использован развиваемый исполнителями комплексный подход, включающий анализ баз данных, высокопроизводительные вычисления и машинное обучение. План работ на первом этапе выполнения проекта включает параметризацию алгоритмов топологического и геометрического анализа в рамках комплекса ToposPro; скрининг на основе геометрико-топологического анализа свободного пространства в полианионных и галогенсодержащих соединениях; совершенствование алгоритма автоматического построения карт ионной диффузии; теоретико-экспериментальное исследование кислород-ионной проводимости в ряде перспективных соединений. Анализ представленных отчетных материалов показал полное соответствие полученных результатов намеченному плану. Параметризация геометрико-топологического анализа катионной проводимости ионов Mg^{2+} , Ca^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+} выполнена в тернарных и кватернарных галогенидах, а также в полианионных соединениях. Полученные результаты позволили провести направленный скрининг базы данных неорганических соединений с целью отбора систем, обладающих достаточными для диффузии рабочего катиона пустотами и каналами. В результате данной процедуры было отобрано несколько десятков наиболее перспективных соединений, содержащих рассматриваемые катионы, а также галогениды и полианионные группы. Последующие расчеты методами валентных усилий связи, кинетического Монте-Карло и DFT позволили выявить структуры с 1D и 3D диффузией высоковалентного катиона. Для изоструктурных исследуемым соединений проведен расчёт влияния температуры на ионную проводимость. Показано хорошее согласие полученных величин с экспериментальными данными. В соответствии с планом выполнена модификация алгоритма автоматического построения карт ионной диффузии в кристаллах Pathfinder (<https://pathfinder.batterymaterials.info>), позволяющая учитывать распределения электронной плотности. Исследование кислород-ионной проводимости в перспективных оксимолибдатах Ln_2MoO_6 ($Ln = Sm, Gd, Dy$) позволило выявить трехпериодическую карту миграции кислорода с низкими значениями энергии. В развитие теоретических исследований проведен синтез наиболее перспективных гетерометаллических оксо-соединений. Результаты проведенных работ легли в основу 3 статей, одна из которых опубликована в журнале из Q1, и неоднократно докладывались на

профильных конференциях. Большой опыт коллектива исполнителей в разработке программного обеспечения для теоретического моделирования материалов и успешное его применение для прогнозирования высококовалентных ионных проводников, наличие хорошего задела и ясный план работ на следующий период не вызывают сомнений в успешном выполнении проекта и достижении плановых показателей.