

- 1. Тематика:** Интеллектуальные и высокотехнологичные материалы (теоретический дизайн, диагностика, синтез) для устройств молекулярной электроники, спинтроники, фотоники, конструкций радиотехнических и информационных систем, применения в медицине и сельском хозяйстве.
- 2. Ключевые слова на русском языке :** спинтроника, фотоника, хемосенсорика, фотохромные соединения, комплексы переходных металлов, управляемые магнитные свойства, квантовохимическое моделирование, пьезокерамика, ферроэлектрики, катализаторы, лиганды, электронная микроскопия, ЯМР, Хромогенные молекулярные системы, Новые материалы, умные материалы, Фотохромизм, спиропираны, диарилэтенy, люминесценция, координационные соединения, сенсоры, фотоперключаемый спин-кроссовер, молекулярные магниты, спиновые кубиты, конфигурационная изомерия
- 3. Ключевые слова на английском языке:** spintronics, photonics, chemosensorics, photochromic compounds, transition metal complexes, controlled magnetic properties, quantum chemical modeling, ferroelectrics, catalysts, ligands, electron microscopy, NMR, New materials, smart materials, Chromogenic molecular systems, photochromism, spiropyrans, diarylethenes, luminescence, coordination compounds, sensors, photo-switchable spin crossover, molecular magnets, spin qubits, isomerism configuration
- 4. Приоритет СНТР:** 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.
- 5. Код ГРНТИ:** 31.15.00 31.21.00
- 6. Код ОЭСР:** 01.04.EI CHEMISTRY, PHYSICAL

План работ

Номер этапа	Наименование	Цель проекта	Дата начала	Дата окончания
1	Разработка комплексного подхода, предусматривающего предэкспериментальное теоретическое моделирование для отбора наиболее перспективных путей исследования; синтез широких систематических серий структур различных классов и их детальное исследование экспериментальными методами с глубоким теоретическим сопровождением интерпретации структурных и энергетических механизмов .	В ходе проекта будут получены и исследованы широкие серии новых органических, неорганических, комплексных органических и координационных соединений и твердых растворов. В ходе проекта будет решена задача создания новых функциональных материалов, обладающих уникальными характеристиками, на основе изучения широкого круга полученных соединений и выявления фундаментальных закономерностей, обуславливающие связь между составом, термодинамической предысторией, молекулярной и кристаллической структурой, микроструктурой и свойствами. Целью работы станет развитие на основе полученных данных фундаментальных основ создания нового поколения интеллектуальных материалов посредством разработки подходов в области конструирования, методов исследования новых материалов на основе «умных» молекулярных систем, наноструктурированных систем, магнито- и сегнетоэлектрических мультифункциональных сред с различной степенью упорядочения и функциональных материалов и покрытий на их основе, обладающих перспективными свойствами для применения в устройствах молекулярной электроники, спинтроники, фотоники и медицины.	01.01.2020	31.12.2020
2	Направленное получение и детальное исследовании перспективных материалов с заданными свойствами, в том числе фотодинамических хромогенных соединений, биоактивных соединений, комплексных соединений, сегнетоэлектриков, ферромагнетиков, сегнетоэластиков и мультиферроиков. Комплексные исследования масштабных серий таких материалов, включающие высокоуровневое моделирование и диагностику структуры с использованием широкого перечня современных физико-химических методов.		01.01.2021	31.12.2021
3	Направленный синтез систематических серий новых соединений , отобранных на основании первых двух этапов с наиболее перспективным сочетанием функциональных и структурных характеристик для создания инновационных материалов широкого профиля: высокочувствительных, в том числе фотодинамических сенсорных систем, фото- и термо-, электро- и магнитоконтролируемых структур, элементов перезаписываемой и архивной молекулярной памяти, инновационных фармпрепаратов, материалов для OLED устройств, сегнетоэлектрических мемристоров и прототипов квантовых кубитов.		01.01.2022	31.12.2022

Основные ожидаемые результаты

Год	Предполагаемый результат	Возможная практическая значимость	Применимость результата
2020	<ul style="list-style-type: none"> • компьютерное моделирование (методами теории функционала плотности и ab initio) для исследования динамического поведения новых механизмов молекулярной бистабильности; • синтез новых молекулярных органических материалов с потенциально высокой биологической активностью ; • разработка и получение новых соединений с фотоуправляемым флуоресцентным откликом, которые могут быть использованы для визуализации пространственных структур с субдифракционным разрешением при помощи флуоресцентной микроскопии. • синтез новых комплексных соединений с потенциально контролируемыми люминесцентными или магнитными свойствами • получение новых динамических молекулярных и наноструктурированных материалов для молекулярной спинтроники и фотоники, высокочастотной энергонезависимой трехмерной памяти, молекулярных переключателей с магнитным и флуоресцентным откликами, твердотельных материалов, проявляющих пьезоэффект. • определение параметров атомной, электронной и магнитной структур перспективных интеллектуальных материалов, важных для высокотехнологического сектора экономики • проведение стационарных и импульсных времязрешенных спектрально-абсорбционных, спектрально-флуоресцентных и фотохимических исследований полученных соединений, направленных на установление структурно-обусловленных корреляций спектральных и кинетических свойств с целью выбора наиболее перспективных соединений, обладающих высокими квантовыми выходами флуоресценции и фотоиницируемой перегруппировки, устойчивостью по отношению к фотодegradации, быстрым откликом на фотооблучение • установление основных типов фазовых диаграмм исследуемых объектов и получение новых экспериментальных и расчетных данных по современным пьезокомпозитам 	<ul style="list-style-type: none"> • Первичные экспериментальные данные по синтезу широкого набора серий интеллектуальных материалов , исследованию их структуры позволят перейти к созданию комплексного подхода для дизайна перспективных соединений различных классов. • В том числе будет осуществлен синтез систематических серий новых молекулярных органических материалов с потенциально высокой биологической активностью ; • Будут получены соединения с фотоуправляемым флуоресцентным откликом, которые могут быть использованы для визуализации пространственных структур с субдифракционным разрешением при помощи флуоресцентной микроскопии. • Будет осуществлен синтез новых комплексных соединений с потенциально контролируемыми люминесцентными или магнитными свойствами • Будут определены параметры структуры перспективных интеллектуальных материалов • По результатам исследований будет осуществлен выбор перспективных соединений, обладающих высокими квантовыми выходами флуоресценции и фотоиницируемой перегруппировки, устойчивостью по отношению к фотодegradации, быстрым откликом на фотооблучение • Будут изучены фазовые диаграммы некоторых исследуемых объектов и получены новые экспериментальные и расчетные данные по современным 	<p>Будут сформулированы фундаментальные основы получения широкого спектра интеллектуальных и высокотехнологических материалов для устройств молекулярной электроники, систем хранения и обработки данных, спинтроники, фотоники, и т.д.</p> <p>Будут разработаны методы молекулярного дизайна для получения веществ и материалов с заданными и регулируемые свойствами.</p> <p>Будут проведены комплексные фундаментальное исследование молекулярных и гибридных органических систем различной сложности, обладающих полезными практическими свойствами</p>

	<ul style="list-style-type: none"> • разработка и получение материалов с рекордными магнитоэлектрическими и магнитодиэлектрическими свойствами на основе исследования фазопереходных явлений в пространственно неоднородных средах с различной степенью сегнетоэлектрического и магнитного упорядочений • разработка концепции создания материалов с высокой плотностью запасенной энергии для создания электро- и магнитокалорических твердотельных элементов нового поколения 	<p>пьезокомпозитам Будут в том числе разработаны методы синтеза и получены образцы молекулярных систем на основе фотохромных соединений с переключаемой флуоресцентной сигнальной функцией. Полученные соединения могут быть использованы в области для субдифракционной флуоресцентной микроскопии для визуализации процессов на внутриклеточном уровне (биология и медицина), анализа поверхностей и наноматериалов в материаловедении.</p>	
2021	<ul style="list-style-type: none"> • дополнительное уточняющее теоретическое моделирование новых интеллектуальных материалов и получение новых динамических молекулярных и наноструктурированных материалов с улучшенными наборами рабочих характеристик для молекулярной спинтроники и фотоники, высокочастотной энергонезависимой трехмерной памяти, молекулярных переключателей с магнитным и флуоресцентным откликами, фотодинамических хемосенсоров, фотопереключаемых флуоресцентных биологических маркеров; • Молекулярный дизайн, синтез и исследование новых полифункциональных спироциклических молекулярных систем, обладающих, наряду с фотохромными свойствами, способностью к комплексообразованию с катионами металлов и позволяющих обеспечить распознавание и визуализацию ионов металлов на основе комплексного спектрально-кинетического анализа динамических процессов фоторегулируемого комплексообразования. Проведение с этой целью исследование процессов комплексообразования фотомодулируемых полифункциональных соединений с целевыми аналитами в стационарных условиях, определение устойчивости образующихся комплексов «субстрат-аналит» и спектральных областей отклика в поглощении и флуоресценции. • Детальное изучение кинетики комплексообразования фотомодулируемых полифункциональных соединений с целевыми аналитами, в том числе под действием активирующего светового излучения. 	<p>Корреляция "структура - свойства" - позволяет сформировать перечень элементов структуры, обеспечивающих наличие в создаваемых материалах наборов характеристик и свойств перспективных для решений в области молекулярной спинтроники и фотоники, высокочастотной энергонезависимой трехмерной памяти, молекулярных переключателей с магнитным и флуоресцентным откликами, фотодинамических хемосенсоров, фотопереключаемых флуоресцентных биологических маркеров, материалов с изменяемой увлажняемостью и другими переключаемыми свойствами.</p> <p>В том числе одним из результатов реализации проекта станет систематическое квантово-химическое изучение серии комплексов переходных металлов, способных к переключению магнитных свойств. Будут предложены комплексы, парамагнетизм которых инициируется фотооблучением.</p> <p>Будут получены новые полифункциональные спироциклические молекулярные системы, обладающие способностью к комплексообразованию с катионами</p>	

	<ul style="list-style-type: none"> •разработка диагностики атомной, электронной и магнитной структур перспективных интеллектуальных материалов; •синтез новых серий органических и комплексных соединений с подтвержденной высокой биологической активностью; <ul style="list-style-type: none"> – на основе комплексных экспериментальных и теоретических (феноменологическое рассмотрение, первопринципные расчеты) исследований установление условий достижения максимальных пьезо-, пиро-, диэлектрических, электрострикционных, магнитоэлектрических откликов в рассматриваемых объектах; установление индуцированных полевых превращений, а также соответствующих им электрокалорических характеристик в различных материалах и, тем самым, получение научно-технической информации, необходимой для освоения нового ресурса альтернативной возобновляемой энергии • создание комплекса биосовместимых материалов для экологически безопасного мониторинга окружающей среды • получение новых твердотельных фотокатализаторов разложения органических отходов и создание массовой технологии их синтеза и переработки 	<p>металлов и позволяющих обеспечить распознавание и визуализацию ионов металлов на основе комплексного спектрально-кинетического анализа динамических процессов фоторегулируемого комплексообразования..</p> <p>Будет исследована кинетика комплексообразования фотомодулируемых полифункциональных соединений с целевыми аналитами, в том числе под действием активирующего светового излучения.</p> <p>- Будет осуществлен синтез новых серий органических и комплексных соединений с подтвержденной высокой биологической активностью;</p> <p>–Будут исследованы условия достижения максимальных пьезо-, пиро-, диэлектрических, электрострикционных, магнитоэлектрических откликов в рассматриваемых объектах;</p>	
2022	<p>- Компьютерное моделирование комплексов переходных металлов, способных к фотонаведенным спиновым перегруппировкам, направленным на настройку молекулярной структуры под электронные и стерические требования основных молекулярных механизмов, управляющих этими процессами - для рационального проектирования новых магнитоактивных соединений.</p> <p>- получение новых динамических молекулярных и наноструктурированных материалов с расширенными наборами характеристик, наиболее перспективных для применения в областях молекулярной спинтроники и фотоники, высокочастотной энергонезависимой трехмерной памяти, молекулярных переключателей с магнитным и флуоресцентным откликами, фотодинамических хемосенсоров, фотопереключаемых флуоресцентных биологических маркеров, материалов с переключаемыми свойствами.</p> <p>- установление фундаментальных закономерностей взаимосвязей</p>	<p>Будут получены серии органических и неорганических материалов, в том числе новых динамических молекулярных и наноструктурированных материалов с расширенными наборами характеристик, наиболее перспективными для практического применения свойствами в высокотехнологических секторах экономики.</p> <p>В том числе, будут разработаны методы синтеза и получены новые спиропираны с о-гетарильными фрагментами, способные функционировать в качестве фотодинамических хемосенсоров на ионы металлов. Тест-системы на основе фотодинамических хемосенсоров могут применяться для мониторинга тяжелых</p>	

<p>наноразмерной атомной, электронной и магнитной структур перспективных интеллектуальных материалов с их характеристиками практически важными для высокотехнологического сектора экономики. В области композиционных материалов - разработка фундаментальных основ создания мультифункциональных композиционных материалов в различных твердотельных состояниях (нано-, ультрадисперсные порошки, моно-, поликристаллы, керамики, стеклокерамики, пористые среды, низкоразмерные системы, многоэлементные гетероструктуры сложной архитектуры) с востребованными практикой свойствами.</p> <ul style="list-style-type: none"> • теоретическое предсказание, моделирование, экспериментальное подтверждение и построение фазовых диаграмм фаз с различным типом упорядочения в координатах состав - температура - давление - электрическое и магнитное поля • создание элементной базы для разработки низкоразмерных и композиционных структур на основе пленок сегнетоэлектриков • разработка нового поколения нанокремниевых материалов, снижающих трение • разработка композиционных мультифункциональных, в том числе, экологически чистых, материалов и воспроизводимых энергоэффективных технологий их создания в виде активных элементов различной топологии и архитектуры с параметрами как превосходящими, так и опережающими мировой уровень: ультравысокими эксплуатационными температурами (выше 1400 К) и скоростью звука (выше 6 км/с), широким диапазоном диэлектрических проницаемостей и механических добротностей (от единиц до десятков тысяч), бесконечной пьезоанизотропией, сочетанием высоких показателей поляризованного состояния и магнитоэлектрических взаимодействий, выраженным электрокалорическим эффектом, гигантской индуцированной пиро-, пьезоэлектрической активностью и пр.). 	<p>металлов в объектах окружающей среды, рыбоводных водоемах и др.</p> <p>Будет проведено исследование закономерностей взаимосвязей наноразмерной атомной, электронной и магнитной структур перспективных интеллектуальных материалов с их характеристиками практически важными для высокотехнологического сектора экономики.</p> <p>Будут сформулированы фундаментальные основы создания мультифункциональных композиционных материалов в различных твердотельных состояниях с востребованными практикой свойствами.</p> <p>Анализ полученных теоретических данных выявит наиболее перспективные комплексы переходных металлов, которые далее будут синтезированы и всесторонне изучены. По результатам анализа функциональных характеристик полученных образцов будет осуществлено патентование наиболее перспективных систем.</p> <p>Практическая значимость результатов также связана с развитием нового поколения отечественной элементной базы перспективной сенсорики и спинтроники, интеллектуальных систем мониторинга в инженерных, технологических, транспортных, биомедицинских и других применениях, включающих, в том числе, и разработку нового типа генераторов «зеленой» электроэнергии и холода.</p>	
--	--	--