

1. Тематика:	Разработка фундаментальных основ, методов и подходов для перспективных технологий сенсорики, катализа, хранения и преобразования энергии
2. Ключевые слова на русском языке :	сенсорика, нанокатализаторы, хранение и преобразование энергии, нанодиагностика, интеллектуальные материалы, Полифункциональные хемосенсоры, naked-eye эффект, абсорбция, флуоресценция, катионы, анионы
3. Ключевые слова на английском языке:	sensorics, nanocatalysts, energy transformation and storage, nano characterization, smart materials, Polyfunctional chemosensors, naked-eye effect, absorption, fluorescence, cations, anions
4. Приоритет СНТР:	переход к экологически чистой и ресурсосберегающей энергетике, повышение эффективности добычи и глубокой переработки углеводородного сырья, формирование новых источников, способов транспортировки и хранения энергии;
	д) противодействие техногенным, биогенным, социокультурным угрозам, терроризму и идеологическому экстремизму, а также киберугрозам и иным источникам опасности для общества, экономики и государства;
5. Код ГРНТИ:	29.19.22, 31.15.28, 31.15.33, 31.21.27
6. Код ОЭСР:	01.04.DY, 01.03.UB, 01.04.EE

План работ

Номер этапа	Наименование		Дата начала	Дата окончания
1	<p>Развитие методики многомасштабного суперкомпьютерного моделирования локальной атомной и электронной структур новых функциональных наноматериалов и проведение компьютерного дизайна локальной атомной и электронной структур новых функциональных наноматериалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии. Синтез и исследование полифункциональных naked-eye хемосенсоров</p>	<p>Целью исследования на этап 2020 года является компьютерный дизайн локальной атомной и электронной структур новых функциональных наноматериалов и молекулярных материалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии. Для достижения этой цели будут развиты и оптимизированы методики многомасштабного суперкомпьютерного моделирования локальной атомной и электронной структур новых функциональных наноматериалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии.</p>	01.01.2020	31.12.2020
2	<p>Разработка новых высокоэффективных методов управляемого синтеза (в том числе с привлечением технологий искусственного интеллекта) функциональных наноматериалов с заданными уникальными характеристиками и определение оптимальных параметров синтеза для получения требуемых физико-химических характеристик функциональных наноматериалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии. Синтез и исследование хемосенсорных соединений, содержащих различные лигандные и фотохромные фрагменты.</p>	<p>Целью исследования на этап 2021 года является разработка новых высокоэффективных методов управляемого синтеза (в том числе с привлечением технологий искусственного интеллекта) функциональных наноматериалов и молекулярных материалов с заданными уникальными характеристиками и определение оптимальных параметров синтеза для получения требуемых физико-химических характеристик функциональных наноматериалов и молекулярных материалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии.</p>	01.01.2021	31.12.2021
3	<p>Развитие методики неразрушающей прецизионной нанодиагностики параметров</p>	<p>Целью исследования на этап 2022 года является определение фундаментальных закономерностей связи параметров локальной</p>	01.01.2022	31.12.2022

<p>локальной атомной и электронной структур активных функциональных материалов, в том числе непосредственно в ходе процессов при реальных технологических условиях (режим operando) и с привлечением исследовательской инфраструктуры мега-класса (источников синхротронного излучения). Применение технологии глубокого машинного обучения для анализа больших объемов данных, получаемых в ходе экспериментов с разрешением по времени в ходе исследований процессов, в которые вовлечены материалы для каталитических реакций, процессов хранения и преобразования энергии. Определение фундаментальных закономерностей связи параметров локальной атомной и электронной структур функциональных материалов с их практически важными характеристиками для технологий сенсорики, катализа, для хранения и преобразования энергии. Синтез и исследование хемосенсорных производных соединений различных классов с наиболее перспективными характеристиками для практического применения</p>	<p>атомной и электронной структур функциональных материалов, в том числе молекулярных материалов, с их практически важными характеристиками для технологий сенсорики, катализа, для хранения и преобразования энергии. Для достижения этой цели будут развиты методики неразрушающей прецизионной нанодиагностики параметров локальной атомной и электронной структур активных функциональных материалов, в том числе непосредственно в ходе процессов при реальных технологических условиях (режим operando) и с привлечением исследовательской инфраструктуры мега-класса (источников синхротронного излучения). Важной частью этих методик будет применение технологии глубокого машинного обучения для анализа больших объемов данных, получаемых в ходе экспериментов с разрешением по времени в ходе исследований процессов, в которые вовлечены материалы для каталитических реакций, процессов хранения и преобразования энергии. На основе применения разработанных методик будет проведена неразрушающая прецизионная нанодиагностика параметров локальной атомной и электронной структур активных функциональных материалов, в том числе непосредственно в ходе процессов при реальных технологических условиях (режим operando) и с привлечением исследовательской инфраструктуры мега-класса (источников синхротронного излучения).</p>		
--	--	--	--

Основные ожидаемые результаты

Год	Номер строки	Предполагаемый результат	Возможная практическая значимость	Применимость результата
2020	1	Будут развиты методики многомасштабного суперкомпьютерного моделирования локальной атомной и электронной структур новых функциональных наноматериалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии. Будет проведен компьютерный дизайн локальной атомной и электронной структур новых функциональных наноматериалов и молекулярных материалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии. Будут получены серии новых полифункциональных naked-eye хемосенсоров	Возможная практическая значимость результата данного этапа проекта заключается в том, что проведённый на этом этапе компьютерный дизайн новых материалов с требуемыми для использования в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии характеристиками позволит на следующем этапе провести целенаправленный синтез таких материалов.	Сами разработанные и оптимизированные на этом этапе методики многомасштабного компьютерного моделирования новых функциональных интеллектуальных материалов могут быть применены для компьютерного дизайна для широкого класса новых материалов, а не только в рассматриваемом в настоящем проекте материалах для использования в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии.
2021	2	Будут разработаны новые высокоэффективные методы управляемого синтеза (в том числе с привлечением технологий искусственного интеллекта) функциональных наноматериалов с заданными уникальными характеристиками для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии. Будут определены оптимальные параметры синтеза для получения требуемых физико-химических характеристик функциональных наноматериалов и молекулярных материалов для применения в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии.	Возможная практическая значимость результата данного этапа проекта заключается в том, что проведённый на этом этапе управляемый синтез (в том числе с привлечением технологий искусственного интеллекта) функциональных наноматериалов с заданными уникальными характеристиками позволит существенно поднять эффективность технологий сенсорики, каталитических процессов, и технологий	Сами разработанные и оптимизированные на этом этапе методики методы управляемого синтеза (в том числе с привлечением технологий искусственного интеллекта) функциональных наноматериалов с заданными уникальными характеристиками могут быть легко модифицированы и применены для синтеза для широкого класса новых материалов, а не только к рассматриваемым в настоящем проекте материалам для использования в технологиях сенсорики, в каталитических

		Будкт осуществлен синтез и исследование хемосенсорных соединений, содержащих различные лигандные и фотохромные фрагменты.	хранения и преобразования энергии.	процессах, для хранения и преобразования энергии.
2022	3	Будут развиты методики неразрушающей прецизионной нанодиагностики параметров локальной атомной и электронной структур активных функциональных материалов, в том числе непосредственно в ходе процессов при реальных технологических условиях (режим operando) и с привлечением исследовательской инфраструктуры мега-класса (источников синхротронного излучения). Технологии глубокого машинного обучения будут применены для анализа больших объемов данных, получаемых в ходе экспериментов с разрешением по времени в ходе исследований процессов, в которые вовлечены материалы для каталитических реакций, процессов хранения и преобразования энергии. Будут определены фундаментальные закономерности связи параметров локальной атомной и электронной структур функциональных материалов с их практически важными характеристиками для технологий сенсорики, катализа, для хранения и преобразования энергии.	Возможная практическая значимость результата данного этапа проекта заключается в том, что будут определены фундаментальные закономерности связи параметров локальной атомной и электронной структур функциональных материалов с их практически важными характеристиками для технологий сенсорики, катализа, для хранения и преобразования энергии. Это позволит существенно поднять эффективность технологий сенсорики, каталитических процессов, и технологий хранения и преобразования энергии.	Сами разработанные и оптимизированные на этом этапе методики неразрушающей прецизионной нанодиагностики параметров локальной атомной и электронной структур активных функциональных материалов, в том числе непосредственно в ходе процессов при реальных технологических условиях (режим operando) и с привлечением исследовательской инфраструктуры мега-класса (источников синхротронного излучения) могут быть легко модифицированы и применены для диагностики для широкого класса новых материалов, а не только рассматриваемых в настоящем проекте материалов для использования в технологиях сенсорики, в каталитических процессах, для хранения и преобразования энергии.