Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0213U004599

Державний реєстраційний номер: 0113U007490

Відкрита

Дата реєстрації: 18-12-2013

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вдосконалення алгоритмів та програмного забезпечення для адаптації програм для дослідження радіаційно-стимульованих процесів, фазових перетворень і ізоморфних заміщень в мінеральних структурах до грід-середовища

Початок етапу: 07-2013

Закінчення етапу: 12-2013

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова НАНУ

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417176

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 03680, м.Київ-187, проспект Академіка Глушкова, 40

Телефон: тел. 5263603т

Телефон: факс 5262008

E-mail: dep145@gmail.com

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення ім. М. П. Семененка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417064

Адреса: пр. Академіка Палладіна, 34, м. Київ, Київська обл., 03680, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445011520

Телефон: 380445011520

E-mail: office.igmr@gmail.com

WWW: https://igmof.org.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 52 - договір з вітчизняною організацією (органами місцевої ради, фондом, асоціацією, концерном тощо)

КПКВК:

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7722 - кошти підприємств, установ, організацій України

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 27 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Вдосконалення алгоритмів та програмного забезпечення для адаптації програм для дослідження радіаційно-стимульованих процесів, фазових перетворень і ізоморфних заміщень в мінеральних структурах до грід-середовища

Назва роботи (англ)

Improvement of algorithms and software to adapt programs for search of radiation-stimulated processes, phase transformations and isomorphic substitutions in the mineral structure in the grid environment

Реферат (укр)

Впроваджено програми та обчислювальні комплекси для обчислень в умовах грід-інфраструктури для вирішення задач наномінералогії та радіаційної мінералогії, пов'язаних з властивостями нанорозмірних мінеральних структур та з впливом радіаційного опромінення на руйнування кристалічної решітки мінералів

Реферат (англ)

Implemented computing systems and software for calculations in terms of grid infrastructure to meet the challenges nanomineralogy mineralogii and radiation that are associated with the properties of nanoscale mineral structures and the influence of radiation on the destruction-crystal lattice of minerals

Індекс УДК: 004.49; 004.056.57, 004.4:004.9; 004.42; 004.67; 004.915;004.4'27

Коди тематичних рубрик НТІ: 50.41.25

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Програмне забезпечення для адаптації програм для дослідження радіаційно-стимульованих процесів, фазових перетворень і ізоморфних заміщень в мінеральних структурах до грід-середовища

Назва продукції (англ): Software to adapt programs for search of radiation-stimulated processes, phase transformations and isomorphic substitutions in the mineral structure in the grid environment

Очікувані результати: Програмне забезпечення

Галузь застосування: Результати розробки будуть використані при вирішенні як фундаментальних так і прикладних задач мінералогії.

Опис продукції (укр): Сконфігуроване програмне забезпечення у грід-середовищі необхідне для виконання досліджень впливу особливостей структури, типу хімічного зв'язку та ізоморфних заміщень на фізичні характеристики мінералів та швидкість аморфізації їх структури під дією автовипромінювання

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2013

Виробник продукції: Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова НАН України

Споживачі продукції: Інститути та уствнови НАН України

Перспективні ринки: Україна

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: за договорами

7. Бібліографічний опис

1)The DL_POLY Molecular Simulation Package. [Електронний ресурс] - Режим доступу: http://www.stfc.ac.uk/CSE/randd/ccg/software/DL_POLY/25526.asp; 2)GULP. [Електронний ресурс] - Режим доступу: http://projects.ivec.org/gulp/; 3)P. Giannozzi et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source softwareproject for quantum simulations of materials", J. Phys. Condens. Matter 21 395502 (2009) 4)Quantum Espresso. [Електронний ресурс] - Режим доступу: http://www.quantum-espresso.org/?page_id=42;

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 21

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Гречко А.В.

Мелащенко Андрій Олегович

Керівник організації:

Сергієнко Іван Васильович (д. ф.-м. н., акад.)

Керівники роботи:

Мелащенко Андрій Олегович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.