# Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0217U001597

**Державний реєстраційний номер:** 0116U005331

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 03-03-2017

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 1

**Назва етапу:** Комп'ютерне моделювання структури та властивостей нового класу матеріалів - високоентропійних сплавів на базі грід-технологій з використанням пакету програм CONQUEST

**Початок етапу:** 04.2016

**Закінчення етапу:** 12.2016

**Вид звітного документа:** Остаточний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416930

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 4240102 , 4242131

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Національна академія наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 00019270

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380442396594

## VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

**Підстава для проведення ДіР:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**Напрям фінансування:** 2.2 - прикладні дослідження і розробки

### Джерела фінансування

**7713 - кошти держбюджету**

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 6541030

| |
|---|
| **Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):** 65 |

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Комп'ютерне моделювання структури та властивостей нового класу матеріалів - високоентропійних сплавів на базі грід-технологій з використанням пакету програм CONQUEST.

### Назва роботи англійською:

Computer modeling of structure and properties of a new class of materials - high entropy alloys based on grid technologies using CONQUEST software package.

### Реферат українською:

Проведено моделювання структури високоентропійних багатокомпонентних сплавів з використанням двох моделей - кристалічної та кластерної. Обчислювальні експерименти виконано в рамках віртуальних організацій "Матеріалознавство перспективних матеріалів" і "CompuChemGridUA". Для сплавів Al-Ti-Zr-V-Cr, Al-Ti-Zr-V-Cr-Fe, Al-Ti-Zr-V-Cr-Fe, Al-Fe-Ti-Zr-V-Hf-Cr теоретично визначені тип кристалічної решітки, параметри решітки, міцність, об'ємний модуль пружності. Розроблено скрипти для запуску грід-завдань.

### Реферат англійською:

The simulation structure of high entropy multicomponent alloys using two models - crystalline and cluster was carried out. Computational experiments were carried out in the framework of virtual organizations "Material Science of Advanced Materials" and "CompuChemGridUA". For alloys of Al-Ti-Zr-V-Cr, Al-Ti-Zr-V-Cr-Fe, Al-Ti-Zr-V-Cr-Fe, Al-Fe-Ti-Zr-V-Hf-Cr theoretically defined crystal type, lattice parameters, strength, bulk modulus. Developed scripts to launch the grid jobs.

**Індекс УДК:** 004.738.5, 004.032.22 004.041

**Коди тематичних рубрик:** 50.39.19

### Керівники роботи

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Фірстов Сергій Олексійович

**Науковий ступінь:** д. ф.-м. н.

**Вчене звання:** професор, акад.

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

## VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

**Назва НТП українською:** Комплекс авторських програм для моделювання структури високоентропійних багатокомпонентних сплавів.

**Назва НТП англійською:** The complex authoring software to simulate the structure of high entropy alloys.

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Результати моделювання структури високоентропійних багатокомпонентних сплавів.

**Галузь застосування:** J 62.09 Інша діяльність у сфері інформаційних технологій і комп'ютерних систем

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Розроблено пакет авторських програм для моделювання структури високоентропійних багатокомпонентних сплавів.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** 2016 - звіт про НДР

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:** ІПМ НАН України, наукові інститути НАН України

**Перспективні ринки:** Україна

**Характер співробітництва з інвестором**

**Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:**

**Права, що надаються інвестору після завершення роботи:**

**Наявність бізнес-плану:**

**Техніко-економічне обгрунтування:**

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

Д.А. Закарян, В.В. Картузов, А.В. Хачатрян. Модель квазигармонического приближения в теории псевдопотенциалов //Доповіді НАНУ. - 2016. - №4. - С. 107-112; D.A. Zakarian, V.V. Kartuzov, A.V. Khachatryan. Ultimate strength of crystals, nanoparticles and nano-ceramics having diamond-like structure // AIMS Materials Science. - 2016. - 3, N 4. - P. 1696-1703; Закарян Д.А., Хачатрян А.В Вычисление прочности нанокерамики с алмазоподобной структурой // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. - К: Труды ИПМ НАНУ. - 2016. - Выпуск 18. - С. 49-55; всього 5.

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Солонін Юрій МИхайлович

**Перелік осіб-виконавців**

А. В. Хачатрян

В. В. Картузов

В. Л. Бекеньов

Д. А. Закарян

П. О. Ларіонов

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності**

