Облікова картка ДіР

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

