Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U004599

Державний реєстраційний номер: 0113U007490

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-12-2013

II. Етап виконання ДіР

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

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова НАНУ

Код за ЄДРПОУ: 05417176

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: тел. 5263603т, факс 5262008

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут геохімії, мінералогії та рудоутворення ім. М. П. Семененка

Код за ЄДРПОУ: 05417064

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

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445011520

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

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

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7722 - кошти підприємств, установ, організацій України

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 27

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

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 англійською:

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 українською:

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 англійською:

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: 50.41.25

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мелащенко Андрій Олегович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

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

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

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Програмне забезпечення

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: 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:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2013

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Інститути та уствнови 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

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;

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Сергієнко Іван Васильович
д. ф.-м. н., 01.05.03

Перелік осіб-виконавців

Гречко А.В.

Мелащенко Андрій Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

