

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U000145

Державний реєстраційний номер: 0111U006523

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Використання грид технологій для першопринципного моделювання енергетики точкових дефектів в берилії

Початок етапу: 04.2011

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут магнетизму НАН та МОН України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 424-10-20

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, 380442343243

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)

Напрямок фінансування: 2.3 - виконання робіт за державними цільовими програмами

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541050

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 70

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Використання ґрид технологій для першопринципного моделювання енергетики точкових дефектів в берилії

Назва роботи англійською:

Using grid technology for ab initio simulation of energy of point defects in beryllium

Реферат українською:

Проведена модернізація локального кластеру, що суттєво розширило його обчислювальні можливості та дозволило підключитися до мережі Ґрид-НАНУ. Методами ab-initio моделювання проведено дослідження всіх можливих стійких міжвузельних положень атома гелію в кристалічній ГЦУ ґратці берилію. Проведено першопринципне дослідження гелієво-вакансійних комплексів в ГЦУ берилії і розрахунок енергій формування та міграції вакансій. Розглянуто випадки знаходження гелію у вузлах ГЦУ ґратки, в різних міжвузельних положеннях і в дівакансійних комплексах. Встановлено, що занурений в ГЦУ-берилій гелій, сприяє формуванню дівакансій.

Реферат англійською:

We upgraded the local cluster, which greatly expanded computing power and allowed us to connect to the Grid of NASU. We investigated all possible stable interstitial positions of the helium atom in the hcp lattice of beryllium by methods ab-initio simulations. We studied of helium-vacancies complexes in the hcp beryllium and calculate the energy of formation and migration of vacancies. We studied cases of finding of helium in the hcp lattice sites, in different interstitial positions and in the divacancy complexes. We found that absorbed helium in hcp beryllium promotes the formation of divacancies.

Індекс УДК: 61:577.1, 537.613:537.637

Коди тематичних рубрик: 76.03.31

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Бар'яхтар В.Г.

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: густина електронних станів, просторовий розподіл зарядової густини, позиція гелію (h0) з мінімальною енергією в ґратці ГЦУ-берилію

Назва НТП англійською: electronic density of states, spatial distribution of charge density, position of a helium atom (h0) with minimum energy in the lattice of hcp beryllium.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: квантомеханічні обчислення за допомогою комп'ютерного моделювання на кластері для паралельних обчислень для ядерної енергетики.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведена модернізація локального кластеру, що суттєво розширило його обчислювальні можливості та дозволило підключитися до мережі Грід-НАНУ. Методами ab-initio моделювання проведено дослідження всіх можливих стійких міжвузельних положень атома гелію в кристалічній ГЦУ ґратці берилію. Проведено першопринципне дослідження гелієво-вакансійних комплексів в ГЦУ берилії і розрахунок енергій формування та міграції вакансій. Розглянуто випадки знаходження гелію у вузлах ГЦУ ґратки, в різних міжвузельних положеннях і в дівакансійних комплексах. Встановлено, що занурений в ГЦУ-берилій гелій, сприяє формуванню дівакансій.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: п'ять років

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НАН України

Перспективні ринки: країни ближнього та дальнього зарубіжжя

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

1. А.С. Бакай, А.Н. Тимошевский, Б.З. Янчицкий. О химической связи и распределении гелия в ГПУ бериллии ФНТ Том 37, Выпуск 9-10, 2011 (992-1000) .2. A.S. Bakai, A.N. Timoshevskii and B.Z. Yanchitsky On chemical bonding of Helium with hcp-Beryllium,

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Бар'яхтар Віктор Григорович

Перелік осіб-виконавців

Бакай О.С.

Бар'яхтар В.Г.

Калькута С.А.

Тимошевський А.М.

Яблоновський С.О.

Янчицький Б.З.

Відповідальний за підготовку

облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

