

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033365

Державний реєстраційний номер: 0124U004952

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Створення МЦКМ для проведення фундаментальних наукових досліджень методами комп'ютерного моделювання.

Початок етапу: 08.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свенціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322761978, 380322761158

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4683.129

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Міждисциплінарний центр комп'ютерного моделювання: створення, фундаментальні дослідження, навчання та сталий розвиток

Назва роботи англійською:

Interdisciplinary Center for Computer Simulations: creation, basic research, teaching and sustainability

Реферат українською:

Створено Міждисциплінарний центр комп'ютерного моделювання як інфраструктурну одиницю Інституту фізики конденсованих систем НАН України. Вченою радою ІФКС затверджено Положення (статут) про МЦКМ. Проведено переговори з гарантантами освітніх програм та адміністрацією фізичного факультету Львівського національного університету ім. І. Франка стосовно проведення навчальних курсів при МЦКМ та про підготовку відповідного договору між ЛНУ ім. І. Франка та ІФКС НАН України. Започатковано регулярні семінари/воркшопи через проведення 1-го міжнародного щорічного воркшопу “Nanophysics meets computer simulations”, в якому 8 листопада приймали участь дослідники зі України (зі Львова, Києва, Харкова), Швейцарії, Франції та США. Створено навчальний курс для початківців в комп'ютерному моделюванні “Основи моделювання методом Монте-Карло”. Проведено ряд наукових передових досліджень з використанням комп'ютерного моделювання згідно запланованих в Календарному плані та Технічному завданні напрямків. Результати опубліковані в 4 наукових статтях в журналах з квартилю Q1 та 5 тезах наукових конференцій. Проведено підготовку приміщення для комп'ютерного класу МЦКМ в головному корпусі ІФКС НАН України. Здійснено закупівлю комп'ютерного класу на 10+1 місць. Здійснено закупівлю шафи та серверів для обчислювального кластеру МЦКМ, який стане основою для високопродуктивних обчислень при МЦКМ.

Реферат англійською:

The Interdisciplinary Center for Computer Simulations (ICCS) was founded as an infrastructural unit of the Institute for Condensed Matter Physics (ICMP) of NAS of Ukraine. The Academic council of ICMP unanimously voted for the Regulations (Charter) of ICCS. Meetings with the administration and responsible persons for M.Sc. and Ph.D. programs at the Department of Physics of the Ivan Franko Lviv National University were organized. It was agreed about the courses for students to be taught at the ICCS and about a corresponding Agreement between the I.Franko LNU and ICMP. Regular seminars/workshop were initiated and a 1-st annual workshop “Nanophysics meets computer simulations” was organized on the 8-th November 2024. In the workshop participated researchers from Ukraine (Lviv, Kyiv, Kharkiv), Switzerland, France and USA. An educational course for beginners in the computer simulations entitled “Basics of Monte-Carlo simulations” was prepared. A number of advanced scientific studies with applications of computer simulations were carried out in agreement with the Calendar plan and Technical task. The results of these studies were published in 4 scientific papers in journals from quartile Q1 and in 5 Abstracts of scientific conferences. A room in the main building of ICMP was cleaned up for the computer lab of ICCS. A purchase of a 10+1 equipment for the computer class was made. A purchase of a rack for cluster units and servers for computing cluster of ICCS was performed. The cluster will be the main unit for the high-performance computing at ICCS.

Індекс УДК: 53.072;53:004

Коди тематичних рубрик: 29.03.77

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Брик Тарас Михайлович

Науковий ступінь: д. ф. -м. н.

Вчене звання: професор, член-кор. НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Статті в міжнародних наукових журналах

Назва НТП англійською: Articles in international scientific journals

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, Створено Міждисциплінарний центр комп'ютерного моделювання. Створено навчальний курс для початківців у комп'ютерному моделюванні. Проведено 1-шу міжнародну щорічну робочу нараду.

Галузь застосування: Дослідження в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За результатами 1-го етапу проекту опубліковано 4 статті в міжнародних фахових журналах: 2 – Journal of Chemical Physics, 1 – Physical Chemistry Chemical Physics, 1 – Scientific Reports.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Фундаментальні дослідження в галузі природничих наук

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

- T. Bryk, A.P. Seitsonen, G. Ruocco, "Is the mechanism of "fast sound" the same in liquids with long-range interactions and disparate mass metallic alloys?" *The Journal of Chemical Physics*, 161, no. 19, (2024) 194503.
- T. Bryk, M. Kopcha, I. Yidak, "Propagation gap for shear waves in binary liquids: Analytical and simulation study", *The Journal of Chemical Physics*, 161, no. 18, (2024) 184505.
- H. Butovych, F. Keshavarz, B. Barbiellini, E. La"nderanta, J. Illytskyi, T. Patsahan, "Role of EDTA protonation in chelation-based removal of mercury ions from water", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 26 (2024): 25402-25411.
- Y. Shchur, H.E. Karout, B. Sahraoui, B., A. Andrushchak, G. Beltramo, D. Pustovyi, S. Vitusevich, P. Huber, A.V. Kityk, "Synthesis, nanocrystalline morphology, lattice dynamics and nonlinear optics of mesoporous SiO₂&LiNbO₃ nanocomposite", *Scientific Reports*, 14 (2024) 24237.
- H. Butovych, T. Patsahan, J. Illytskyi, E. La"nderanta, B. Barbiellini, F. Keshavarz, "Chelation of heavy metals by ethylenediaminetetraacetic acid in aqueous solution", *EMLG-JMLG Annual Meeting 2024, Structure and Dynamics of Hydrogen-Bonded Systems*, 8-13 September, 2024, Trieste, Italy, Book of Abstracts, p. 96.
- H. Butovych, F. Keshavarz, J. Illytskyi, B. Barbiellini, E. La"nderanta, T. Patsahan, "Computer simulation of complexes formed by heavy metal ions and EDTA molecules in aqueous solution", 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics "Nanophysics meets computer simulations", November 8, 2024, Lviv, Ukraine, Book of Abstracts, p. 9.
- R. Sokyрко, A. Baumketner, "Aggregation pathways of amyloidogenic KFFE peptide", 1st annual workshop on the use of computer simulations in nanophysics "Nanophysics meets computer simulations", November 8, 2024, Lviv, Ukraine, Book of Abstracts, p. 13.
- T. Bryk. "Exotic Properties of Condensed Matter Under High Pressure From ab initio Computer Simulations", 4th International Conference on Innovative Materials and NanoEngineering (IMNE'2024), September 13-16, 2024, Dovgolyuka, Ukraine. Conference programme and Book of abstracts. p.33.
- Ya. Shchur, A.V. Kityk, V. Adamiv, S. Vitysevich, A. Andrushchak "Experimental and Theoretical Investigations of Nanocomposite Materials Based on Si and SiO₂ Porous Matrices", 4th International Conference on Innovative Materials and NanoEngineering (IMNE'2024), September 13-16, 2024, Dovgolyuka, Ukraine.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Брик Тарас Михайлович

д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Ільницький Ярослав Миколайович

(д. ф.-м. н., 01.04.24)

Баумкетнер Андрій Богданович

(д. ф.-м. н., 01.04.24)

Дручок Максим Юрійович

(к. ф.-м. н., 01.04.24)

Кукаркін Назар Борисович

Пацаган Микола Іванович

Пацаган Тарас Миколайович

(д. ф.-м. н., 01.04.24)

Фаренюк Олег Ярославович

Щур Ярослав Йосифович

(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Відповідальний за підготовку

Бзовська І.С.

облікових документів

Телефон

+38 (032) 276-77-86

Реєстратор

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

