Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U006777

Державний реєстраційний номер: 0113U004534

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-02-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Програмно-апаратний комплекс для моделювання та аналізу природних та штучних нано-систем у грід-середовищі.

Початок етапу: 03.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 525-12-20_____

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

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: 2.3 - виконання робіт за державними цільовими програмами

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 70

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Програмно-апаратний комплекс для моделювання та аналізу природних та штучних нано-систем у грід-середовищі.

Назва роботи англійською:

Hardware-software system for modeling and analysis of natural and synthetic nano-systems in a Grid environment.

Реферат українською:

Грід-технології активно та плідно використовується для моделювання природних та штучних наносистем, зокрема біологічних макромолекул та штучних нанокластерів. Найбільш активно використовуються методи молекулярної динаміки та квантової хімії, що дозволяють моделювати структуру та динаміку складних надмолекулярних систем та отримувати траєкторії всіх атомів системи у часі. Будь-яке моделювання такого роду складається з трьох етапів: 1) конструювання модельної системи 2) розрахунок траєкторій або рівноважної геометрії 3) аналіз траєкторій або рівноважної геометрії та інтерпретація результатів. На сьогодні лише другий етап цього процесу успішно інтегрований до грід-середовища, тоді як конструювання систем та аналіз результатів проводяться локально. Під час виконання проекту було створено стабільний API бібліотеки Pteros. Код бібліотеки позбавлено від зайвих залежностей та приведення його до загальних стандартів форматування. Розроблено детальну документацію, створено самовчитель по роботі з бібліотекою. Створено детальну інструкцію по інсталяції бібліотеки на обчислювальні кластери українського грід-сегменту, та встановлено бібліотеку на обчислювальних кластерах, що входять до ВО MolDynGrid. Розроблено кардинально нову систему аналітичних плагінів, та продемонстровано можливість використання плагінів написаних як на мові C++ так і на мові Python. За допомогою квантово-хімічних розрахунків було визначено найбільш імовірні структури кластерів, що складаються з 2-10 атомів германію, термінованих йодом. Виявлено ланцюжкові структури для найменших кластерів, кільця в перехідній області (7-8 атомів Ge), та подібні до об'ємної структури германієві кластери з 9-10 атомів. Для всіх характерних кластерів з 2-10 атомів розраховано їхні коливальні спектри (ІЧ і КР), які можуть бути корисні для подальшої ідентифікації цих кластерів в експериментах. Результати викладено в статті, яка надіслана в друк до Phys. Rev. B.

Реферат англійською:

Grid technology is actively and fruitfully used for modeling of natural and artificial nanosystems. In particular it is useful for investigation of biological macromolecules and synthetic nanoclusters. Methods of molecular dynamics and quantum chemistry are widely used for modeling of structure and dynamics of complex supramolecular systems and obtaining paths of all atoms in the system over time. Any such modeling consists of three steps: 1) constructing a model system 2) calculation of paths or equilibrium geometry 3) an analysis of the trajectories or equilibrium geometry and interpretation of results. Till now, only the second stage of this process has been successfully integrated in the Grid environment, whereas systems design and analysis are carried out locally. During the execution of the project a stable API of Pteros library was created. Library code has been spared from unnecessary dependencies and was reduced to common standards in formatting. A detailed documentation was developed, and a tutorial for working with the library was created. Complete instructions for installing the library on computing clusters of Ukrainian Grid segment were written, and the library itself was installed on computer clusters included in VO MolDynGrid. Complitly new system of analytic plugins was developed and it was demonstrated the ability to use plugins written in both C + + and Python language. The most probable structure of clusters consisting of 2-10 atoms of germanium terminated with iodine was determined by quantum-chemical calculations. It was found that the smallest clusters are possessed linear structures, medium ones (7-8 atoms Ge)

are possessed rings forms, in the transition region, and the biggest ones with 9-10 atoms of germanium have bulk structure. Vibrational spectra (IR and RS) were calculated for all the characteristic clusters of size of 2-10 atoms. These results may be useful for the further identification of the clusters in experiments. The results presented in this work are contributed to Phys. Rev. B.

Індекс УДК: 539.196.3, 539.196.3

Коди тематичних рубрик: 29.29.25

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Яценко Леонід Петрович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерна бібліотека для нестандартного молекулярного аналізу та моделювання, структура та коливні спектри кластерів йодиду германію.

Назва НТП англійською: Computer library for nonstandard analysis and molecular modeling, structure and vibrational spectra of iodide germanium clusters.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Бібліотека Pteros дозволяє здійснювати в гріді конструювання складних молекулярних систем та аналіз результатів моделювання, що значно прискорює процес обчислень в порівнянні з використанням локальних ресурсів. Її реалізовано на мові C++ з використанням високорівневих засобів, що робить її інтерфейс дуже простим та зрозумілим для непрофесійних програмістів. Проведено комплекс обчислень і встановлено найбільш енергетично вигідні структури атомарних кластерів (ZnO)n і (ZnS)n, де n=12, 13.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 3 роки.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: науково дослідні установи та університети.

Перспективні ринки: Україна, зарубіжні країни.

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

Oleksandr V. Savytskyi, Semen O. Yesylevskyy, Alexander I. Kornelyuk, Asymmetric structure and domain binding interfaces of human tyrosyl-tRNA synthetase studied by molecular dynamics simulations, Journal of Molecular Recognition, 2013, 26, 2; S. O. Yesylevskyy, A. P. Demchenko, S. Kraszewski, and C. Ramseyer. Cholesterol Induces

Uneven Curvature of Asymmetric Lipid Bilayers. The Scientific World Journal, V. 2013 (2013), Article ID 965230, http://dx.doi.org/10.1155/2013/965230; S.O. Yesylevskyy, S. Kraszewski, C. Ramseyer. Determination of the shape and curvature of non-planar lipid bilayers in molecular dynamics simulations. J. Mol. Model. Submitted; Yesylevskyy, S.O., Kraszewski, S., Picaud, F., Ramseyer, C. Efficiency of the monofunctionalized C60 fullerenes as membrane targeting agents studied by all-atom molecular dynamics simulations. Molecular Membrane Biology. V. 30, N. 5-6, P. 338-345; A. Dmytruk. Atomic composition, structure, and vibrational spectra of small germanium clusters terminated by iodine // Submitted to Phys. Rev. B; А.Н. Дмитрук, Е.В. Шинкаренко, И.Н. Дмитрук, П.И. Коренюк, И.В. Блонский. Нанокластерные фазы бинарных полупроводников и благородных металлов: технология, численное моделирование, оптические и нелинейнооптические свойства. // Тезисы докладов IV Международной конференции "Наноразмерные системы: строение - свойства - технологии" (НАНСИС-2013), 19-22 ноября 2013, Киев, Украина, стр. 18.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Порошин Володимир Миколайович

Перелік осіб-виконавців

Єсилевський Семен Олександрович

Березецька Наталя Михайлівна

Блонський Іван Васильович

Дмитрук Ігор Миколайович

Дмитрук Андрій Миколайович

Рябцев Андрій Володимирович

Шинкаренко Євген Вікторович

Яценко Леонід Петрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

