

Разработка проблемно-ориентированных интерфейсов для ППП ABINIT и VASP

Параллельные вычисления в ВЦ ДВО РАН

ГридННС ▾ Работа на кластере ▾ Вычислительные ресурсы ▾ Проекты ▾ О нас ▾

Главная

Общая информация по ГридННС

Опубликовано: 05.07.2011 – 16:36

Проект ГридННС выполняется в рамках федеральной целевой программы "Развитие инфраструктуры наноиндустрии в Российской Федерации на 2008 – 2010 годы", Мероприятие 2.1. – I очередь, лот 4.

Цель работы – обеспечение географически распределенных научных и инженерных коллективов – участников национальной нанотехнологической сети (ННС) возможностью эффективного удаленного использования информационной, коммуникационной и вычислительной инфраструктуры.

Участники проекта (помимо ВЦ ДВО РАН):

- НИИ ядерной физики имени Д.В.Скобельцына МГУ имени М.В.Ломоносова
- Российский научный центр "Курчатовский институт"
- Объединенный институт ядерных исследований
- Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова РАН

Национальная нанотехнологическая сеть (ННС) – совокупность предприятий различных организационно-правовых форм, обеспечивающих и осуществляющих скоординированную кооперативную деятельность по разработке и коммерциализации нанотехнологий, включая проведение фундаментальных и прикладных исследований, подготовку кадров, развитие инфраструктуры наноиндустрии, организацию производства и непосредственное производство нанотехнологической продукции.

Документы:

- О национальной нанотехнологической сети Постановление правительства РФ от 23 апреля 2010 г., № 282.
- Участники ННС
- О ФЕДЕРАЛЬНОЙ ЦЕЛЕВОЙ ПРОГРАММЕ "РАЗВИТИЕ ИНФРАСТРУКТУРЫ НАНОИНДУСТРИИ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ НА 2008–2010 ГОДЫ" Постановление правительства РФ от 2 августа 2007 г., № 498.
- О СОСТОЯНИИ И ПЕРСПЕКТИВАХ РАЗВИТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ НАНОТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СЕТИ, НАУЧНАЯ СЕССИЯ НИЯУ МИФИ–2010, Том II
- О принципах формирования национальной нанотехнологической сети Российской Федерации
- Основные принципы и понятия ГридННС

Виртуальные организации в рамках проекта ГридННС, поддерживаемые Вычислительным центром ДВО РАН:

ВО	Краткое описание	Администратор
abinit	Пользователи ВО могут запускать программное обеспечение abinit на вычислительных ресурсах	Шаповалов

YywebApp

Welcome Konstantin | [logout](#) | [profile](#) | [password](#)

Home Help ▾

Геометрия **Атомы** Управление Параметры Молекулярная динамика Дополнительные параметры

‡ Титан (Ti) Число атомов этого типа: 2 [Удалить](#)

Водород (H) [Добавить атом](#)

Число типов атомов (ntypat)

Число различных типов атомов. Определяется автоматически.

Общее число атомов (natom)

Полное число атомов в ячейке. Определяется автоматически.

Способ задания координат атомов

Способ задания координат атомов:

Reduced - определяет атомные положения в пределах элементарной ячейки в относительных координатах в реальном пространстве примитивных трансляций (НЕ в декартовых координатах). Они принимают дробные значения между 0 и 1 и являются безразмерными.

Cartesian(A) - определяет декартовы координаты атомов в пределах элементарной ячейки. Задается в атомных единицах Бора (1 Бор = 0.5291772108 Å).

Cartesian(B) - определяет декартовы координаты атомов в пределах элементарной ячейки, в ангстремах (1 Бор = 0.5291772108 Å).

Координаты атомов

Координаты атомов задаются в соответствии с порядком их упоминания. Способ задания координат выбирается в выпадающем списке выше.

Это поле необходимо заполнить.

[submit task](#)



Моделирование атомной и электронной структуры нано- и объемных материалов

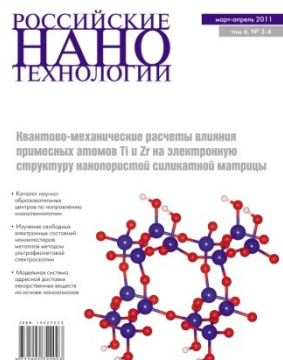
Решаемые задачи:

- Исследование атомной и электронной структуры нанопористого SiO_2
- Исследование процессов взаимодействия наноразмерных частиц титана с кислородом
- Моделирование влияния дефектов и примесей на структурные и электронные свойства титаната бария (BaTiO_3) и талька ($\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$)

Полученные результаты:

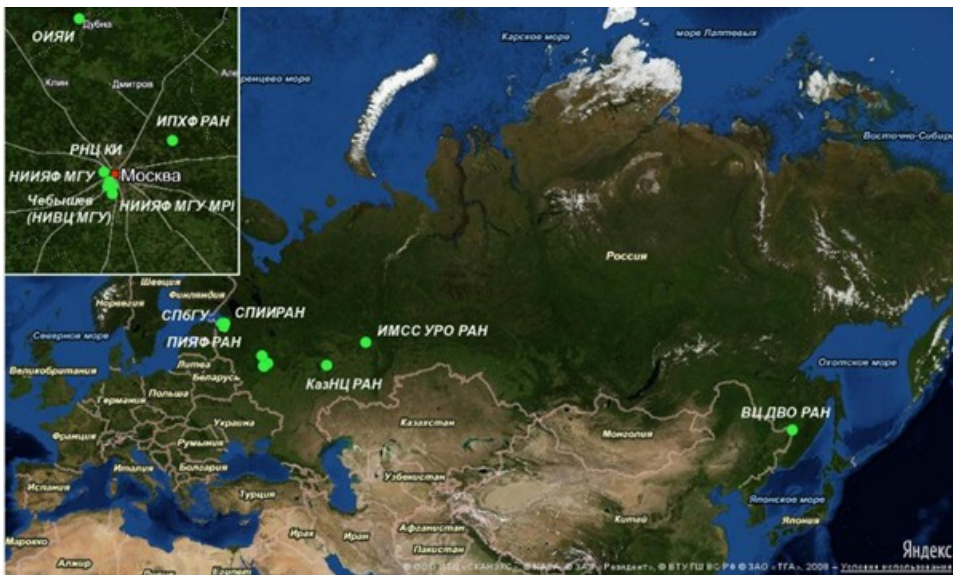
- Проведен детальный анализ электронной и локальной атомной структуры в окружении примесных атомов титана и циркония в структуре нанопористого оксида кремния
- Исследовано влияния ионов циркония на атомную и электронную структуру титаната бария
- Исследовано влияние атомов фтора на атомную и электронную структуру и стабильность талька

Результаты работ
опубликованы в
журналах:





“Региональная” Грид



RASNET

