**Сведения о ходе выполнения проекта по соглашению о предоставлении субсидии**

**от 27.10.2015 г. № 14.577.21.0181**

В ходе выполнения проекта по Соглашению о предоставлении субсидии от 27.10.2015 г. № 14.577.21.0181 с Минобрнауки России в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» на этапе № 1 в период с 27.10.2015 г. по 31.12.2015 г. выполнялись следующие работы:

1.1 Аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы, затрагивающей научно-техническую проблему, исследуемую в рамках ПНИЭР.

1.2 Разработка методов и алгоритмов расчета поверхности потенциальной энергии системы в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

1.3 Разработка методов и алгоритмов моделирования отдельных атомов с целью расчета электронной структуры как многомерной функции координат ядер.

1.4 Разработка методов и алгоритмов анализа возможности образования химических связей в молекуле.

1.5 Проведение патентных исследований в соответствии с ГОСТ Р 15.011-96.

1.6 Разработка методов и алгоритмов расчета межмолекулярных связей, расчета электронной конфигурации наноразмерной системы в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

1.7 Разработка методов и алгоритмов численного решения уравнений квантовой механики в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

При этом были получены следующие результаты:

1. Аналитический обзор современной научно-технической, нормативной, методической литературы, затрагивающей научно-техническую проблему, исследуемую в рамках ПНИЭР.

2. Методы и алгоритмы расчета поверхности потенциальной энергии системы в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

3. Методы и алгоритмы моделирования отдельных атомов с целью расчета электронной структуры как многомерной функции координат ядер.

4. Методы и алгоритмы анализа возможности образования химических связей в молекуле.

5. Проведены патентные исследования в соответствии с ГОСТ Р 15.011-96.

6. Методы и алгоритмы расчета межмолекулярных связей, расчета электронной конфигурации наноразмерной системы в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

7. Методы и алгоритмы численного решения уравнений квантовой механики в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

Обобщая полученные результаты можно сказать, что в рамках первого этапа проекта были проработаны методы и алгоритмы моделирования наноматериалов и наноразмерных структур в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра.

Результаты проведенных в рамках ПНИЭР исследований позволяют сделать следующие выводы:

* разработка различных методов и алгоритмов моделирования наноматериалов и наноразмерных структур является перспективными инструментами разработки новых наноматериалов и наноразмерных структур;
* целесообразно использование нескольких типов алгоритмов моделирования наноматериалов и наноразмерных структур в масштабе времени порядка 10-15 секунды и в пространственном масштабе порядка 10-10 метра, выбор конкретного типа алгоритма должен производиться либо вручную при экспертной оценке результатов моделирования, либо автоматически на основе вычисления и анализа набора критериев качества моделирования;
* разработка различных методов и алгоритмов моделирования наноматериалов и наноразмерных структур позволяет значительно сократить аппаратурные затраты по сравнению с реализацией этих задач на нескольких модулях универсальных вычислителей, что приводит к увеличению надежности системы, снижению ее энергопотребления и стоимости.

Результаты проекта позволят достичь:

* значительного сокращения точечных дефектов в наноматериалах;
* расширения области использования современных наноматериалов и наносистем;
* возможности моделирования наноматериалов и наносистем различных свойств с максимальным приближением к реальным условиям;
* расширения сферы использования концевых эффектов электронных, эмиссионных и антенных свойств наноматериалов;
* расширения возможностей современного аналитического оборудования в части реализации методов расчета свойств наноматериалов и наносистем.

Задачи, определенные планом-графиком для решения на первом этапе ПНИЭР, решены в полном объеме.

Результаты могут быть использованы для проведения научных и прикладных исследований различных наноматериалов и наносистем; создания и производства принципиально новых наноматериалов и наносистем с целью оценки их электромагнитных, механических и прочих свойств; организации специализированных учебных курсов, связанных с ядерной физикой в связке с наноиндустрией.

Обобщая вышесказанное, на первом ПНИЭР подготовлен задел для дальнейшей работы по разработке методов и алгоритмов моделирования наноматериалов и наноразмерных структур.

Полученные результаты будут интересны учебным заведениям; организациям различных форм собственности, работающими в сфер исследования, создания и производства перспективных наносистем и наноматериалов.

Комиссия Минобрнауки России признала обязательства по Соглашению на отчетном этапе исполненными надлежащим образом.