Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U107257

Державний реєстраційний номер: 0121U111872

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Літературний пошук. Розробка методики попередньої генерації та фільтрації наборів конформацій

Початок етапу: 07.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Мурманська, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445527150, 380445510613, 380445732643

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, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 65.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження ліпофільності фторовмісних циклоалкіламідів та їх конформаційної рівноваги квантово-хімічними методами

Назва роботи англійською:

Investigations of the lipophilicity of fluorine-containing cycloalkylamides and their conformational equilibrium by the methods of quantum chemistry

Реферат українською:

Були згенеровані набори конформацій, що вже попередньо відфільтровані за енергіями та кластеризовані. Проведено квантово-хімічне дослідження отриманих конформацій та розрахунок параметрів для кожної з отриманих геометрій.

Реферат англійською:

Bullets are generated by gaining conformations, but also in front of the filter for energies and clustering. Quantum-chemical advances have been made on the correct conformations and parameters for the cutaneous geometries.

Індекс УДК: 547.595, 544 , 539.19; 544.14 , 547 , 547:544.18; 547:544.16; 547:544.12 , 547.51

Коди тематичних рубрик: 31.21.21.15, 31.15, 31.15.03, 31.21, 31.21.15, 31.21.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кирильчук Андрій Анатолійович

Науковий ступінь: к. х. н.

Вчене звання: н.с

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кальченко Віталій Іванович
д.х.н., 02.00.03, 02.00.08

Перелік осіб-виконавців

Єгоров Дмитро Вікторович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Кирильчук Андрій Анатолійович

Телефон

+38 (098) 059-11-69

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

