

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U000908

Державний реєстраційний номер: 0113U001091

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження електронних властивостей гетеронаносистем

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної Академії Наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 521-34-23, 526-59-98

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, 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2849.1

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження електронних властивостей гетеронаносистем

Назва роботи англійською:

Research into the electronic properties of heteronanosystems

Реферат українською:

Удосконалено теорію функціонала густини та її застосувань для розрахунку структурних та енергетичних характеристик широкого класу багатоелектронних молекулярних систем, зокрема ендоедральних фулеренів. На основі розвинутої концепції молекулярної самоорганізації створено нову теорію функціонування ферментів та регуляції ферментативних реакцій. Досліджено термоелектричні властивості молекулярних структур та електронні властивості бінарних шаруватих структур з нановключеннями.

Реферат англійською:

The density functional theory and its applications are improved to calculate the structure and energy characteristics of a wide class of many-electron molecular systems, endohedral fullerenes in particular. Basing on the developed concept of molecular self-organization, a new theory of enzyme functioning and enzymatic reaction regulation is created. The thermoelectric properties of molecular structures and electronic properties of binary layer-like structures with nano-insertions are investigated.

Індекс УДК: 539.193/.194, 537.311; 530.199; 538.931

Коди тематичних рубрик: 29.29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Христофоров Леонід Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дослідження електронних властивостей гетеронаносистем

Назва НТП англійською: Research into the electronic properties of heteronanosystems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1 Дослідження і розробки в галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Удосконалено теорію функціонала густини та її застосувань для розрахунку структурних та енергетичних характеристик широкого класу багатоелектронних молекулярних систем, зокрема ендоедральних фулеренів. На основі розвинутої концепції молекулярної самоорганізації створено нову теорію функціонування ферментів та регуляції ферментативних реакцій. Досліджено термоелектричні властивості молекулярних структур та електронні властивості бінарних шаруватих структур з нановключеннями.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: грудень 2017

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідницькі установи, що працюють у напрямках фізики твердого тіла, хімічної фізики, фізичної хімії, біофізики та біохімії

Перспективні ринки: Технологічно розвинуті країни Західної Європи та Сполучені Штати Америки.

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

59 публікацій

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Загородній Анатолій Глібович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Бомбело Костянтин Васильович

Бугрій Галина Василівна

Герасименко Ірина Миколаївна

Глосковська Наталія Вікторівна

Кручинін Сергій Павлович

Крячко Євген Сергійович

Філіппова Ніна Олександрівна

Христофоров Леонід Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

