Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U003687

Державний реєстраційний номер: 0117U004135

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-02-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Проведення QSAR досліджень. Реалізація та впровадження експертної системи.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 048 766-20-44: факс 048 765-96-02

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: 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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 370.699

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Прогнозування параметрів потенціалів міжмолекулярної взаємодії на основі QSPR аналізу термодинамічних властивостей різноманітних органічних сполук та їх бінарних сумішей

Назва роботи англійською:

Prediction of intermolecular interaction potentials' parameters based on QSPR analysis of the thermodynamic properties of various organic compounds and their binary mixtures

Реферат українською:

Для різних органічних речовин та їх бінарних сумішей а) сформовані бази даних других віріальних коефіцієнтів б) розроблені QSPR моделі, що прогнозують другі віріальні коефіцієнти в) на основі побудованих QSPR моделей сформована експертна система для позаекспериментального скринінгу цих термодинамічних властивостей.

Реферат англійською:

For various organic substances and their binary mixtures a) databases of the second virial coefficients are generated b) QSPR models were developed for prediction of second virial coefficients; c) an expert system was formed on the basis of the QSPR models for the virtual screening of these thermodynamic properties.

Індекс УДК: 547.9;577.1, 547.587: 547.898: 661.865+544.25+535.37

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Недоступ Вадим Іоаннович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерне програмне забезпечення "Thermo Expert" у вигляді експертної системи прогнозу других віріальних коефіцієнтів сполук та їх бінарних сумішей.

Назва НТП англійською: Computer software "Thermo Expert" as expert system for prediction of second virial coeficients of compounds and their binary mixtures.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Експертну систему розроблено у виді комп'ютерної програми "Thermo Expert" для використання на комп'ютерах IBM PC під управлінням операційної системи MS Windows XP/Vista/7/8, 10. Програма дозволяє для органічних сполук та їх бінарних сумішей проводити прогноз значень других віріальних коефіцієнтів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 12.12.2018 р.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути та установи хімічного, біологічного та фармацевтичного напрямку .

Перспективні ринки: Україна , Країни Європи

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

Кузьмин В.Е. Методика определения параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия газовых смесей / Кузьмин В.Е., Мокшина Е.Г., Недоступ В.И. // Технические газы . - Т.18, № 4 . - 2018 . - С. 38-41.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович

Кузьмін Віктор Євгенович

Кулінський Максим Олександрович

Михайлова Тетяна Вікторовна

Огніченко Людмила Миколаївна

Хромов Олександр Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

