Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U001444

Державний реєстраційний номер: 0113U000197

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Формування бази даних. Генерація початкового навчального та тестових наборів.

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітного документа: Проміжний 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: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 310.6

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурні фільтри для відсіву мутагенних (тест Еймсу) органічних сполук

Назва роботи англійською:

Structural filter for screening of mutagenic (Ames test) organic compounds

Реферат українською:

Сформовано базу даних (понад 6 тисяч) органічних сполук різних класів з відомими значеннями мутагенності на тест Еймсу. Базу розділено на дві вибірку (тренувальну та тестову). Для всіх сполук розраховано симплексні дескриптори для подальшого QSAR аналізу

Реферат англійською:

The database (more than 6,000) organic compounds of different classes with known values of mutagenicity (Ames test). Base is divided onto two samples (training and test). Simplex descriptors has been calculated for all compounds for further QSAR analysis

Індекс УДК: 004.4; 004.42, 004.42: 575.224

Коди тематичних рубрик: 50.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кузьмін Віктор Євгенович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: База даних органічних сполук різних класів з відомими значеннями мутагенності на тест Еймсу

Назва НТП англійською: The database of organic compounds of different classes with known values of mutagenicity (Ames test).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Сформовано базу даних органічних сполук різних класів з відомими значеннями мутагенності на тест Еймсу (більше 6 тис. сполук).

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

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

Перспективні ринки: Україна, Росія

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

Sushko Iurii, Novotarskyi Sergii, K?rner Robert, Pandey Anil Kumar, Cherkasov Artem. Applicability Domains for Classification Problems: Benchmarking of Distance to Models for Ames Mutagenicity Set // Journal of Chemical Information and Modeling.- 2010.-V 50, No 12.- P. 2094-2111

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович

Варламова Катерина Юріївна

Дегтяренко Ольга Миколаївна

Кузьмін Віктор Євгенович

Ляховський Анатолій Вікторович

Михайлова Тетяна Вікторовна

Муратов Євген Наілевич

Огніченко Людмила Миколаївна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

