

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U000100

Державний реєстраційний номер: 0115U001060

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

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

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітнього 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: 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)

Напрямок 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.): 254.001
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експертна система прогнозування критичних параметрів органічних сполук та їх бінарних сумішей

Назва роботи англійською:

he expert system for prediction of the critical parameters of organic compounds and its binary mixtures

Реферат українською:

Сформовано бази даних критичних властивостей індивідуальних речовин та бінарних сумішей. Розроблено нові QSPR моделі, які прогнозують критичні параметри індивідуальних органічних речовин та їх бінарних сумішей. На основі побудованих QSPR моделей сформована експертна система для позаекспериментального скринінгу критичних параметрів органічних речовин різних класів.

Реферат англійською:

Database of critical properties of pure substances and binary mixtures has been formed. Novel QSPR models that predict critical parameters of individual organic substances and their binary mixtures have been constructed. On the basis of constructed QSPR models expert system for virtual screening of critical parameters of organic compounds of different classes has been developed.

Індекс УДК: 54:51Ф7;54:007, 004.42: 541.66

Коди тематичних рубрик: 31.01.77

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: Комп'ютерне програмне забезпечення "Thermo Expert" у вигляді експертної системи прогнозу критичних властивостей сполук.

Назва НТП англійською: Computer software "Thermo Expert" as expert system for prediction of critical properties of compounds.

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 проводити прогноз значень критичних властивостей.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути хімічного, біологічного та фармацевтичного напрямку та служби і установи, що займаються аналізом екологічної безпеки сполук

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

Мокшина Е.Г. QSPR моделирование критических свойств бинарных смесей органических соединений / Е.Г. Мокшина, П.Г. Полищук, В.И. Недоступ, В.Е. Кузьмин // Журнал Органической Химии - 2016 - Т.52, №1. - С. 13-18.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович

Дегтяренко Ольга Миколаївна

Кузьмін Віктор Євгенович

Кулінський Максим Олександрович

Михайлова Тетяна Вікторівна

Мокшина Олена Георгіївна

Огніченко Людмила Миколаївна

Хромов Олександр Іванович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

