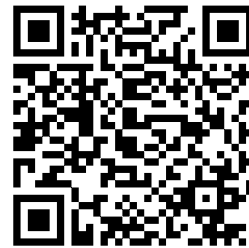


Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U000912

Державний реєстраційний номер: 0117U004135

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

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

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2018

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)

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.): 331.313
--

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:

На основі аналізу літературних джерел сформовано базу даних органічних сполук та їх бінарних сумішей з відомими значеннями других віріальних коефіцієнтів (263 індивідуальних сполуки, 130 сумішей) при різних температурах.

Реферат англійською:

The database of organic compounds and their binary mixtures with known values of second virial coefficients (263 individual compounds, 130 mixtures) at different temperatures has been created from the analysis of different literary sources.

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

Назва НТП англійською: Prediction of intermolecular interaction potentials' parameters based on QSPR analysis of the thermodynamic properties of various organic 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: Сформовано базу органічних сполук та їх бінарних сумішей з відомими значеннями других віріальних коефіцієнтів при різних температурах.

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

Mokshyna E. Predictive QSPR modelling for the second virial coefficient of the pure organic compounds / E. Mokshyna, V.I. Nedostup, P.G. Polishchuk, V.E. Kuz'min // Mol. Inf. - 2015. - V.34, I.1. - P. 53-59.

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**

