

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U006939

Державний реєстраційний номер: 0109U007123

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-12-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Створення експертної системи для оцінки активності молекул відносно цитохрому P450

Початок етапу: 01.2010

Закінчення етапу: 12.2010

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 558-52-66, 573-25-52

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації України

Код за ЄДРПОУ: 37200303

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 246-39-10

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.): 30

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експертна система для передбачення активності сполук, що взаємодіють з цитохромом Р450

Назва роботи англійською:

Predictive expert system for compound-P450 cytochrome interactions.

Реферат українською:

Створено експертну систему на основі ЕТМ-ШНМ методу та веб-платформі OCHEM (<http://ochem.eu>). Експертна система буде використовуватись для кількісної та якісної оцінки сполук відносно їх здатності виступати інгібіторами чи активаторами різноманітних ізоферментів цитохрому Р450. Розроблено нові методи визначення області використання отриманих моделей для оцінки токсичності хімічних сполук.

Реферат англійською:

The expert system on the base ETM-ANNs and OCHEM web- platform (<http://ochem.eu>) have been created. The Predictive Expert System will provide qualitative and quantitative assessment of molecules with respect to their ability to inhibit or activate CYP 450. New methods for applicability domain detection for chemical compound toxicity evaluation were developed.

Індекс УДК: 519.68

Коди тематичних рубрик: 27.47.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Ковалішин В.В

Науковий ступінь: к.х.н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Експертна система для передбачення токсичності хімічних сполук

Назва НТП англійською: The predictive toxicity expert system

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: комп'ютерна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створена комп'ютерна експертної системи на основі електронно - топологічного методу (ЕТМ) та методу штучних нейронних мереж (ШНМ) для використання в токсикологічних дослідженнях.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначаються НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Фармацевтичні компанії, науково дослідні інститути

Перспективні ринки: Україна, СНД, та зарубіжні країни

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кухар Валерій Павлович

Перелік осіб-виконавців

Прокопенко В.В.

Відповідальний за підготовку

облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

