

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0212U008385

Державний реєстраційний номер: 0112U005368

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-11-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Конформаційний аналіз канонічних дезоксирибонуклеозидів методами MP2 та DFT

Початок етапу: 07.2012

Закінчення етапу: 11.2012

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (044)526-0759

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державне агентство з питань електронного урядування України

Код за ЄДРПОУ: 37471818

Місцезнаходження: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2071730

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): 2209020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 35

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Конформаційна мінливість 2'-дезоксирибонуклеозидів та 2'-рибонуклеозидів: квантово-хімічне дослідження

Назва роботи англійською:

Conformational capacity of 2'-deoxyribonucleosides and 2'-ribonucleosides: a quantum-chemical study

Реферат українською:

Квантово-хімічними розрахунками методами MP2/6-311++G(d,p)/DFT B3LYP/6-31G(d,p) та MP2/6-311++G(d,p)/MP2/6-31G(d,p) проведено повний конформаційний аналіз канонічних дезоксирибонуклеозидів. Визначено енергетичні та структурні характеристики всіх конформерів. У рамках теорії QTAİM встановлено наявність внутрішньомолекулярних Н-зв'язків у всіх конформерах.

Реферат англійською:

A complete conformational analysis of canonical deoxyribonucleosides was done by quantum-chemical calculations methods MP2/6-311++G(d,p)/DFT B3LYP/6-31G(d,p) and MP2/6-311++G(d,p)/MP2/6-31G(d,p). The energy and structural characteristics of all conformers were established. Within the QTAİM theory the presence of intramolecular H-bonds in all conformers was established.

Індекс УДК: 577.32, 577.332

Коди тематичних рубрик: 34.15.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Говорун Дмитро Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Повне конформаційне сімейство канонічних дезоксирибонуклеозидів

Назва НТП англійською: Complete conformational family of canonical deoxyribonucleosides

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: К 73.10.0

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Квантово-хімічними розрахунками методами MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) та MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) проведено повний конформаційний аналіз канонічних дезоксирибонуклеозидів. Визначено енергетичні та структурні характеристики всіх конформерів, а також температурні залежності відношення заселеностей конформерів з S конформацією цукру до конформерів з N конформацією у діапазоні температур 298,15-420 К. У рамках теорії QTAIM встановлено наявність внутрішньомолекулярних Н-зв'язків у всіх конформерах.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Профільні НДІ

Перспективні ринки: Україна, СНД, ЄС

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

Єльська Ганна Валентинівна

д. б. н.

Перелік осіб-виконавців

Д.М.Говорун

О.О. Броварець

Р.О. Жураківський

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

