

Реєстраційна картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0124U000205

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-01-2024



II. Підстава для проведення робіт

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрям фінансування: 2.2 - Прикладні наукові дослідження і науково-технічні (експериментальні) розробки ()

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

У тому числі по роках:	
2024	1050.000 тис. грн.
2025	1260.000 тис. грн.
2026	1512.000 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 3822.000 тис. грн.	

III. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01601, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

IV. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, Одеса, 65080, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

QSAR/QSPR моделювання різноманітних наночастинок для позаекспериментального скринінгу їхніх функціональних властивостей

Назва роботи англійською:

QSAR/QSPR modeling of various nanoparticles for extra-experimental screening of their functional properties

Мета роботи українською:

Розробка моделей QSAR/QSPR для позаекспериментального скринінгу функціональних властивостей наночастинок та імплементація цих моделей у вигляді експертної системи.

Мета роботи англійською:

Development of QSAR/QSPR models for virtual screening of functional properties of nanoparticles and implementation of these models as an expert system.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: Прикладні наукові дослідження

Очікувані результати: Методи, теорії, гіпотези; Програмні продукти, програмно-технологічна документація

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, академік НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Формування і верифікація баз даних по функціональним властивостям різноманітних наночастинок. Генерація початкових навчальних і тестових наборів. Розрахунок дескрипторів.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 2

Назва етапу: Побудова QSAR/QSPR моделей зв'язку між структурою наночастинок та їх функціональними властивостями. Верифікація моделей, визначення областей компетентності, вибір моделей з найкращою прогнозуючою здатністю.

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 3

Назва етапу: Аналіз і узагальнення результатів дослідження зв'язку між структурою наночастинок та їх властивостями. Виявлення структурних факторів, що впливають на прояв специфічних властивостей. Побудова експертної системи прогнозу функціональних властивостей наночастинок.

Початок етапу: 01.2026

Закінчення етапу: 12.2026

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 54:51Ф7;54:007, 544.165:54.31:004.94

Коди тематичних рубрик: 31.01.77

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович
д. х. н., професор, академік НАН України

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Наталія Олександрівна

Телефон

+38(067)7243955

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна