

# Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0221U107257

Державний реєстраційний номер: 0121U111872

Відкрита

Дата реєстрації: 30-12-2021



## 1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Літературний пошук. Розробка методики попередньої генерації та фільтрації наборів конформацій

Початок етапу: 07-2021

Закінчення етапу: 12-2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

## 2. Виконавець

Назва організації: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Мурманська, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Телефон: 380445527150

Телефон: 380445510613

Телефон: 380445732643

E-mail: [ioch@ioch.kiev.ua](mailto:ioch@ioch.kiev.ua)

WWW: <http://ioch.kiev.ua>

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Адреса: вул. Академіка Кухаря, буд. 5, Київ, Київ, 02094, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445527150

Телефон: 380445510613

Телефон: 380445732643

E-mail: [ioch@ioch.kiev.ua](mailto:ioch@ioch.kiev.ua)

WWW: <http://ioch.kiev.ua>

**Назва організації:** Національна академія наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 00019270

**Адреса:** вул. Володимирська, буд. 54, Київ, Київ, 01601, Україна

**Підпорядкованість:**

**Телефон:** 380442343243

**E-mail:** prez@nas.gov.ua

**WWW:** <http://nas.gov.ua>

## 4. Джерела та напрями фінансування

**Підстава для проведення робіт:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**КПКВК:** 6541030

**Напрямок фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

**Джерело фінансування:** 7713 - кошти держбюджету

**Фактичний обсяг фінансування за звітний етап:** 65.000 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Дослідження ліпофільності фторовмісних циклоалкіламідів та їх конформаційної рівноваги квантово-хімічними методами

### Назва роботи (англ)

Investigations of the lipophilicity of fluorine-containing cycloalkylamides and their conformational equilibrium by the methods of quantum chemistry

### Реферат (укр)

Були згенеровані набори конформацій, що вже попередньо відфільтровані за енергіями та кластеризовані. Проведено квантово-хімічне дослідження отриманих конформацій та розрахунок параметрів для кожної з отриманих геометрій.

### Реферат (англ)

Bullets are generated by gaining conformations, but also in front of the filter for energies and clustering. Quantum-chemical advances have been made on the correct conformations and parameters for the cutaneous geometries.

**Індекс УДК:** 547.595, 544 , 539.19; 544.14 , 547 , 547:544.18; 547:544.16; 547:544.12 , 547.51

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 31.21.21.15, 31.15, 31.15.03, 31.21, 31.21.15, 31.21.23

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

## 7. Бібліографічний опис

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 18

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

## 9. Заключні відомості

### Перелік осіб-виконавців

Єгоров Дмитро Вікторович

### Керівник організації:

Кальченко Віталій Іванович (д.х.н., акад.)

### Керівники роботи:

Кирильчук Андрій Анатолійович (к. х. н., н.с)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.