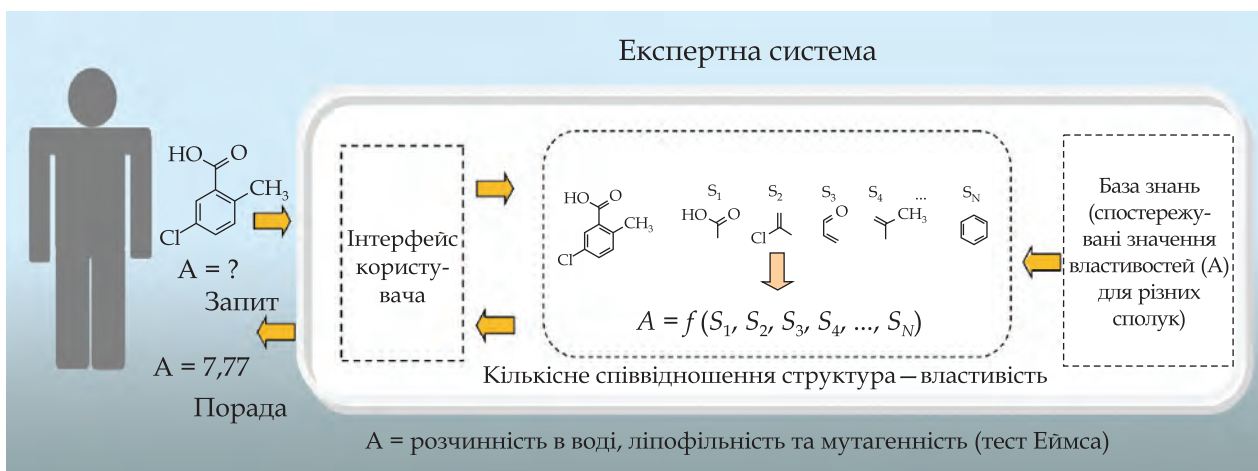


КОМП'ЮТЕРНА ЕКСПЕРТНА СИСТЕМА ДЛЯ ПРОГНОЗУ РОЗЧИННОСТІ У ВОДІ, ЛІПОФІЛЬНОСТІ ТА МУТАГЕННОСТІ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК



Призначення

На основі структурної формули органічної сполуки експертна система прогнозує її розчинність у воді, ліпофільність та мутагенність (тест Еймса). Прогнозовані значення цих властивостей можуть бути використані як фільтр у медичній хімії для створення нових лікарських препаратів та біологічно активних сполук; дають змогу замінити високовартісне дослідження зазначених властивостей комп'ютерним експериментом

Характеристики

Експертна система реалізована у вигляді комп'ютерної програми, призначеної для експлуатації в операційних системах Windows XP/Vista/7/8/10. Рекомендована конфігурація: Pentium III і вище, від 1 Gb оперативної пам'яті, 250 Mb на жорсткому диску. Вхідна інформація: файл зі структурною формулою органічної сполуки. Вихідна інформація: передбачені значення властивостей

Переваги

Експертна система немає аналогів в Україні і відповідає світовим стандартам прогнозування розчинності у воді, ліпофільності та мутагенності біологічно активних органічних сполук

Рівень готовності розробки. Пропозиції до комерціалізації

IRL8, TRL5
На замовлення здійснюється інсталяція програми, а також навчання персоналу

Охорона інтелектуальної власності

IPR2

Контактна інформація

Михайлова Тетяна Вікторівна, Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, + 38 067 706 10 94, e-mail: office.physchem@nas.gov.ua