

**Паспорт научной специальности 1.4.5. «Хемоинформатика»
(отрасль науки – технические)**

Область науки:

1. Естественные науки

Группа научных специальностей:

1.4. Химические науки

Наименование отрасли науки, по которой присуждаются ученые степени:

Химические

Технические

Шифр научной специальности:

1.4.5. Хемоинформатика

Направления исследований:

1. Разработка методов прогнозирования физико-химических свойств химических соединений.
2. Разработка методов анализа квантовых закономерностях атомной и молекулярной физики на макроуровне и макроскопических квантовых эффектах.
3. Прогнозирование физико-химических свойств химических соединений и верификация прогнозов.
4. Разработка и создание новых материалов.
5. Разработка алгоритмов анализа информации о физико-химических свойствах соединений и материалов.
6. Обобщение информации о физико-химических свойствах соединений и материалов и разработка и создание соответствующих баз данных.

Смежные специальности (в т.ч. в рамках группы научной специальности):

1.3.16. Атомная и молекулярная физика

2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы