

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

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. Развитие компьютерных представлений химической структуры полимеров, кристаллов и биологических макромолекул. Разработка интерактивных графических редакторов ввода и редактирование структур, заданных с помощью различных типов внешнего представления. Создание общих принципов валидации структурных моделей.

2. Создание и развитие баз данных, содержащих информацию о структурах и свойствах полимеров, кристаллов и биологических макромолекул, а также спектральные характеристики этих соединений. Развитие и применение методов математической статистики и машинного обучения (в том числе, интеллектуального анализа данных) для работы с указанными объектами.

3. Моделирования связи “структура-свойство” (SAR/QSAR/QSPR, structure-activity relationships/quantitative structure-activity/property relationships). Молекулярные дескрипторы: классификация, характеристики и дальнейшее развитие. Решение обратной задачи в проблеме структура– свойства новых химических соединений.

4. Виртуальный скрининг – разработка новых лекарственных препаратов для поиска химических соединений, обладающих нужным видом биологической активности. Развитие вычислительных процедур, позволяющих автоматизировать просмотр баз данных и отбор химических соединений, для которых прогнозируется наличие искомых свойств.

5. «Компьютерный» синтез – методы, алгоритмы и реализующие их компьютерные программы, оказывающие помощь химику в планировании синтеза органических соединений, прогнозировании результатов и дизайне новых типов органических реакций на основе обобщения данных по известным синтетическим превращениям.

6. Молекулярный дизайн - направленная генерация структур химических соединений (молекулярных графов), которые, в соответствии с моделями, должны обладать набором заранее заданных свойств.

7. Дизайн химических структур de novo – совместное использование генераторов молекулярных графов и физико-химических моделей, описывающих взаимодействие лиганд – белок.

8. Фармакофорный поиск - поиск соответствия между набором пространственных и электронных признаков, необходимых для обеспечения оптимальных супрамолекулярных взаимодействий со специфической биологической мишенью, которые могут вызывать или блокировать её биологический ответ и характеристиками молекул из базы данных, находящихся в допустимых конформациях.

9. Прогнозирование свойств химических соединений и материалов - применение методов математической статистики и машинного обучения для построения моделей, позволяющих по описанию структур химических соединений предсказывать их свойства (физические, химические, биологическую активность).

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

1.4.4. Физическая химия