

計算化学;ケモインフォマティクス;
計算材料科学[2019. 01]

- 10/00 計算理論化学, すなわち量子化学, 分子力学,
分子動力学または類似のものの理論的側
面, に特に適合した ICT[2019. 01]
- 20/00 ケモインフォマティクス, すなわち化学粒
子, 元素, 化合物または混合物の物理化学
的または構造的データの取り扱い, に特
に適合した ICT[2019. 01]
- 20/10 ・化学反応, 合成または処理の分析または設
計[2019. 01]
- 20/20 ・分子実体, その部分の識別あるいは化学的
組成物の識別[2019. 01]
- 20/30 ・化合物, 化学的組成物または混合物の特性
予測[2019. 01]
- 20/40 ・化学的構造または物理化学的データの検
索[2019. 01]
- 20/50 ・分子設計, 例. 薬[2019. 01]
- 20/60 ・in silico によるコンビナトリアルケミ
ストリ[2019. 01]
- 20/62 ・ライブラリ of 設計[2019. 01]
- 20/64 ・ライブラリ of スクリーニング[2019. 01]
- 20/70 ・機械学習, データマイニングまたはケモメ
トリックス[2019. 01]
- 20/80 ・データの可視化[2019. 01]
- 20/90 ・プログラム言語; コンピューティングアー
キテクチャ; データベースシステム; デー
タウェアハウス[2019. 01]
- 60/00 計算材料科学, すなわち設計, 合成, 加工, 特
性評価または利用に関連する材料または
現象の物理的または化学的特性を調査す
るために特に適合した ICT[2019. 01]
- 99/00 このサブクラスの他のグループには分類さ
れない主題事項[2019. 01]