

G16C 計算化学；ケモインフォマティクス；  
計算材料科学 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]

- 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 I C T [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 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 I C T [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/10 ・ 化学反応，合成または処理の分析または設計 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 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 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/30 ・ 化合物，化学的組成物または混合物の特性予測 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/40 ・ 化学的構造または物理化学的データの検索 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/50 ・ 分子設計，例．薬 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/60 ・ i n s i l i c o によるコンビナトリアルケミストリ [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/62 ・ ・ ライブラリの設計 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/64 ・ ・ ライブラリのスクリーニング [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 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 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 20/80 ・ データの可視化 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 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 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 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 I C T [ 2 0 1 9 . 0 1 ]
- 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 [ 2 0 1 9 . 0 1 ]