

# План презентации

1. Содержание презентации
2. Хемоинформатика, cheminformatics: что за дисциплина
  - (a) Место дисциплины среди других, связь
3. Зарождение хемоинформатики, немного истории, предназначение
4. Представление данных
  - (a) Абстрактный тип данных - помеченый (или молекулярный) граф
  - (b) Строковое представление - SMILES
  - (c) Форматы MOL, SDF
5. Некоторые из основных направлений
  - (a) Библиотеки соединений, аналог википедии для химии
  - (b) Виртуальный скрининг, молекулярный докинг
  - (c) Моделирование экспериментов *in silico*
6. Известные программные продукты
7. Заключение
8. Взгляд в будущее, что актуально сейчас для химиков

## Источники

Труды, успевшие стать фундаментальными в хемоинформатике. Книги.

1. F.K. Brown (1998). «*Chapter 35. Chemoinformatics: What is it and How does it Impact Drugs Discovery*
2. B.A. Bunin, B. Siesel, G.A. Morales, J. Bajorath (2007). *Chemoinformatics: Theory, Practice, & Products*
3. A.R. Leach, V.J. Gillet (2007). *An introduction to chemoinformatics*

Блоги, лекции, презентации, википедия.

1. Материалы AACIMP-2008, курс “Хемоинформатика”  
<http://summerschool.ssa.org.ua/>
2. Дмитрий Павлов, *Навигация в мире органических соединений*.  
<http://shmat-razum.blogspot.com/2010/07/blog-post.html>
3. Сергей Кокорин, *Заметки о Cheminfo'S. Strasbourg Summer School on Chemoinformatics*.
4. Википедия (русская, английская)