

Chemoinformatica, o informatica chimica, è la disciplina che si serve di metodi informatici per risolvere problemi chimici: ha come oggetto le strutture molecolari e tutte le proprietà e i dati a esse collegate.

Agli inizi degli anni Ottanta la grafica molecolare iniziava a diffondersi: il computer-aided drug design veniva utilizzato dalle prime aziende farmaceutiche negli Stati Uniti ma era ancora sconosciuto in Italia; il termine “chemoinformatica” non esisteva nemmeno. Poi, con il rapidissimo evolvere delle tecnologie informatiche, la gamma di soluzioni e potenzialità è aumentata in modo entusiasmante nel settore della chimica. Da allora vengono generati sempre più dati – sperimentali, chimico-strutturali, chimico-fisici, analitici, biologici, farmacologici, biomedici – e aumenta così la necessità di archivarli, cercarli e renderli facilmente fruibili, così da trasformare i dati in informazione e l’informazione in conoscenza.

In questo volume, pensato e scritto per docenti, studenti e professionisti che vogliono arricchire le proprie conoscenze nelle diverse aree della chemoinformatica, vengono illustrati termini, applicazioni e novità di questa disciplina che non sempre trovano uno spazio adeguato nelle trattazioni classiche. Senza bisogno di prerequisiti o competenze specifiche, il lettore può trovare, da un lato, un’ampia panoramica dell’ambito chemoinformatico e, dall’altro, nuovi spunti per ulteriori approfondimenti.