

## Ogólny opis zawodu

Chemia informatyczna (zwana też chemioinformatyką) jest dziedziną, w której techniki informatyczne są wykorzystywane w rozwiązywaniu różnych problemów i zagadnień z zakresu chemii i biochemii. Jest to nauka, która pojawiła się niedawno w związku z ciągłym rozwojem nowoczesnych technologii oraz poszukiwaniem ich zastosowań w różnych gałęziach przemysłu. Długotrwałe i drogie badania z zakresu np. farmacji czy kosmetologii wymusiły poszukiwanie takiej metody tworzenia leków i kosmetyków, która maksymalnie skróci czas ich przygotowywania. Stąd też pojawił się pomysł zastosowania programów informatycznych w innych naukach, to z kolei wpłynęło na konieczność wykształcenia specjalistów z zakresu nie jednej, a dwóch dziedzin. Chemioinformatyka jest właśnie takim połączeniem nauki przyrodniczej (chemii) i matematycznej (informatyki).

Przykładowe zadania podejmowane w ramach chemii informatycznej to:

- katalogowanie i przechowywanie danych chemicznych, zarządzanie bazami danych,
- prowadzenie specjalistycznych obliczeń z wykorzystaniem programów komputerowych,
- praktyczne wykorzystanie oprogramowania chemicznego (np. GAUSSIAN, Gchemical),
- projektowanie leków i substancji za pomocą narzędzi modelowania molekularnego,
- analizowanie, przetwarzanie danych strukturalnych,
- badanie przestrzeni chemicznej i eksploracja związków chemicznych,
- projektowanie i udoskonalanie programów potrzebnych do prowadzenia badań,
- tworzenie wirtualnych modeli potencjalnych związków chemicznych i ogólnie pojęte modelowanie chemiczne,
- wykorzystanie matematyki i statystyki w chemii,
- projektowanie sieci komputerowych.

W związku ze specyfiką pracy chemika-informatyka, jego głównym miejscem pracy jest biuro, za narzędziem pracy - komputer. Używa go nie tylko do modelowania, wizualizacji czy prowadzenia obliczeń, ale także do kontaktu ze specjalistami innych dziedzin oraz uzupełniania dokumentacji z badań.

Ponieważ zawód ten jest związany z dwiema różnymi dziedzinami, konieczna jest zarówno znajomość chemii i jej działów, jak i ogólna wiedza z zakresu informatyki, różnych systemów operacyjnych i języków programowania. Dodatkowo konieczna jest znajomość języków obcych, zwłaszcza języka angielskiego, co pomaga w obsłudze programów i aplikacji.

Chemioinformatyka jest rozwijającą się nauką, dlatego niewielu jest obecnie wykwalifikowanych specjalistów z tej dziedziny. Trudno zatem określić jednoznacznie możliwe zarobki. Szacuje się jednak, iż przeciętne zarobki mogłyby wynosić średnio krajowa (ok. 3200zł).

## Wymagania psychofizyczne i predyspozycje

Zawód ten wymaga cech charakterystycznych zarówno dla chemika, jak i dla informatyka. Najważniejsze z nich to m. in.: dokładność, systematyczność, wytrwałość i umiejętność długotrwałej koncentracji. Przydaje się zdolność analitycznego i logicznego myślenia, kreatywność, myślenie abstrakcyjne, precyzyjne wyrażanie swoich myśli. Istotne są zarówno umiejętność pracy samodzielnej, jak i komunikatywność oraz zdolność współpracy z innymi. Poczucie odpowiedzialności za wykonywaną pracę, zdolność szybkiego reagowania oraz dostosowanie się do zmieniającej się sytuacji oraz umiejętność pracy pod presją czasu to kolejne cechy mające duże znaczenie, zwłaszcza w pracy nad innowacjami i rozwijaniem nowych technologii i programów. Konieczne są uzdolnienia manualne, które pozwalają zarówno na poprawną obsługę komputera, jak i innych narzędzi pracy (np. sprzęt laboratoryjny, narzędzia pomiarowe) oraz zdolność do przewidywania skutków wydarzeń i wyciągania z nich wniosków.

### Zainteresowania

Osoba myląca o zawodzie chemioinformatyka powinna interesować się naukami przyrodniczymi, zwłaszcza chemią i biotechnologią oraz różnymi działami informatyki (zwłaszcza informatyką praktyczną i stosowaną). Zainteresowania te mogą być zdobywane poprzez czytanie specjalistycznych czasopism naukowych, samodzielne nauki i prace z komputerem oraz działalność w kołach naukowych lub udział w szkoleniach. Ponadto warto być na bieżąco z tymi dziedzinami przemysłu, w których chce się podjąć pracę w przyszłości (farmaceutyka, kosmetologia, ochrona środowiska itp.). Można też śledzić w mediach nowość z zakresu chemioinformatyki i dowiadywać się o nowe trendy na rynku.

### Przeciwwskazania zdrowotne

Pracę chemioinformatyka mogą podejmować osoby niepełnosprawne w zakresie układu ruchu, natomiast trudno ci w zakresie posługiwania się komputerem i czynami górnymi uniemożliwiający uprawianie tego zawodu. Wady narządów zmysłu, zwłaszcza wzroku i słuchu stanowią poważne utrudnienie, ale wiele zależy od tego, w jakim stopniu zachowana jest ich sprawność. Przeciwwskazania mogą dotyczyć alergii (zwłaszcza skórnych) i schorzeń astmatycznych, jest to jednak związane z charakterem pracy.

### Wymagane kwalifikacje i ścieżka kształcenia

Zawód chemioinformatyka stanowi nową niszę na rynku pracy, stosunkowo niewiele jest więc uczelni wyższych oferujących kształcenie w tym zakresie. Aby zostać specjalistą należy ukończyć studia magisterskie (kierunek: chemia, specjalizacja: chemia informatyczna). Warto przejść szkolenia lub kursy, które pozwolą poznać oprogramowanie związane z modelowaniem w chemii oraz inne programy wykorzystywane w chemioinformatyce (np. BALLView, ScanChem, CSB). W czasie studiów konieczne jest odbycie praktyki studenckiej, co pozwala lepiej zorientować się w specyfice pracy w zawodzie oraz poznać realia na rynku pracy.

### Przykładowe miejsca pracy:

- Unilever (przedsiębiorstwo wielobranżowe)
- Promax Pharma Sp. z o.o. (firma farmaceutyczna)
- Sanofi-Aventis (firma farmaceutyczna)
- Dr Irena Eris (Centrum Naukowo-Badawcze, branża kosmetyczna)
- Ziaja (laboratorium badawczo-rozwojowe)
- L'Oréal (dział badań naukowych)
- GlaxoSmithKline (producent leków)

### Dodatkowe informacje:

- Amerykańskie Stowarzyszenie Chemioinformatyków: <http://www.qsar.org/>
- Brytyjskie Stowarzyszenie Chemioinformatyków: <http://www.ukqsar.org/ukqsar/main.html>
- Międzynarodowe Stowarzyszenie Chemików: <http://www.csa-trust.org/>
- Portal o modelowaniu molekularnym: <http://www.molnet.eu/>
- Artykuł o wykorzystaniu komputerów przez firmy farmaceutyczne: [http://www.idg.pl/artykuly/22152\\_0/Firmy.farmaceutyczne.dosiadaja.komputerow.html](http://www.idg.pl/artykuly/22152_0/Firmy.farmaceutyczne.dosiadaja.komputerow.html)
- Portal informacyjny dla chemioinformatyków: <http://www.cheminformatics.org/>
- Badania prowadzone przez Chemioinformatyków na uniwersytecie w Cambridge: <http://www-ucc.ch.cam.ac.uk/>

