

- طراحی و مدل سازی مولکول های زیست فعال با استفاده از داکینگ مولکولی، بررسی کمی و کیفی رابطه ساختار شیمیائی-اثر (SAR و QSAR) و روش های Ab initio و دینامیک مولکولی
- سنتز ترکیبات هتروسیکل با اثرات بالقوه دارویی
- بررسی رابطه ساختار و اثر بیولوژیک ترکیبات هتروسیکل
- بهینه سازی واکنش های شیمیایی و فرایندهای زیستی با استفاده از روشهای مدرن محاسباتی