

NIMI	<b>Mati Karelson</b>
TEADUSALA	Loodusteadused ja meditsiin
UURIMISTÖÖ PEASUUNAD	Kondenseeritud keskkondade kvantiteooria. Keemiliste ühendite reaktsioonivõime uurimine. Kvantitatiivsed struktuur-aktiivsus/omadus sõltuvused. Keemiliste ühendite tehnoloogiliste omaduste ja protsesside modelleerimine. Heterotsükliliste ühendite keemia. Tehisintellekt keemias. Molekulaartechnologia. Biomeditsiiniline keemia.
VALIMISAEG	12. detsember 2007
AKADEEMIA OSAKOND	Bioloogia, geoloogia ja keemia osakond
KONTAKTANDMED	Ravila 14 a, 50411 TARTU Telefon: 737 5255 Faks: 737 5264
SÜNNIAEG ja -KOHT	27. detsember 1948 Tartu
TÖÖKOHT	Tartu Ülikooli molekulaartechnologia professor (alates 2005)
HARIDUS	1967 Tartu Tamme Gümnaasium 1972 Tartu Ülikool keemia eriala <i>cum laude</i>
TEADUSKRAAD	1975 keemiakandidaat Tartu Ülikooli juures, teema: <i>"Проверка применимости электростатических моделей в органической химии"</i>
TEENISTUSKÄIK	1972–1975 Tartu Ülikooli (TÜ) orgaanilise keemia kateedri nooremteadur, vanemteadur 1975–1992 TÜ keemilise kineetika ja katalüüsi labori vanemteadur, sektorijuhataja, juhataja 1992–2004 TÜ teoreetilise keemia korraline professor 1999–2002 TÜ tehnoloogiakeskuse direktor 2004–2014 Tallinna Tehnikaülikooli molekulaartechnologia professor 2005–... TÜ molekulaartechnologia professor
TUNNUSTUSED	1996 Florida Heterotsükliliste Ühendite Keskuse auliige 2001 Eesti Vabariigi teaduspreemia keemia ja molekulaarbioloogia alal 2002 Tartu medal 2006 Eesti Vabariigi Valgetähe III klassi teenetemärk 2008 Tartu aukodanik 2014 Eesti Teaduste Akadeemia Ostwaldi nimeline medal
TEADUS- ORGANISATSIOONILINE ja -ADMINISTRATIIVNE TEGEVUS	EESTIS: 1997–2002 Tartu Teaduspargi nõukogu esimees 2001–2004 Kaitseministeeriumi sõjalise teaduse ja hariduse komisjoni liige 2003–2005 Eesti Teadusfondi nõukogu liige, keemia ja molekulaarbioloogia ekspert- komisjoni esimees 2005–... Ettevõtluse Arendamise Sihtasutuse tehnoloogia valdkonna hindamis- komisjoni ja tehnoloogia arenduskeskuse juhtkomitee liige 2005–2014 Vabariigi Peaministri teadus-arendusnõunik 2006–2011 Vabariigi Presidendi Mõttekoja liige Üliõpilaste teadustööde konkursi hindamiskomisjoni liige

MUJAL:  
1990–... Rahvusvahelise Kvantbioloogia ja Farmakoloogiaühingu (ISQBP) liige  
1999–... Ameerika Keemiaseltsi (AMS) liige  
1996–2001 Euroopa Teadus- ja Tehnikaalase Koostöö Organisatsiooni (COST) juht-  
komitee liige, Eesti Rahvuslik koordinaator  
2004–2006 Eesti Vabariigi esindaja NATO Teadus- ja Tehnoloogianõukogus (NATO  
RTB)  
2003–... Rahvusvahelise Arvutuskeemia Akadeemia (IAMC) tegevliige  
Rahvusvahelise Matemaatilise Keemia Akadeemia (AMC) liige

TEGEVUS TEADUSLIKE  
VÄLJAANNETE  
TOIMETUSTES

EESTIS:  
MUJAL:  
1993–1998 *International Journal of Quantum Chemistry* (USA) toimetuskolleegiumi  
liige  
ARKIVOC (USA) toimetuskolleegiumi liige

JUHENDAMISEL  
KAITSTUD VÄITEKIRJAD

DOKTORITÖÖD (nimi, aasta, töö pealkiri, kus kaitsstud):  
Tamm, T. 1993. Quantum-Chemical Simulation of Solvent Effects. Tartu Ülikool.  
Lobanov, V. 1995. Quantitative Structure- Property Relationships in Large Descriptor  
Spaces. Tartu Ülikool.  
Lan, M. 1996. QSPR Treatment of Solvent Effects on Physical Properties in Liquids  
and Solutions. Florida Ülikool.  
Maran, U. 1997. Quantum-Mechanical Study of Potential Energy Surfaces in Different  
Enviroments. Tartu Ülikool.  
Leis, J. 1998. Conformational Dynamics and Equilibria in Amides. Tartu Ülikool.  
Petrukhin, R. 2001. Industrial Applications of the Quantitative Structure-Property  
Relationships. Tartu Ülikool.  
Sild, S. 2001. QSPR/QSAR Approaches for Complex Molecular Systems. Tartu  
Ülikool.  
Perkson, A. 2002. Synthesis and Characterisation of Nanostructured Carbon. Tartu  
Ülikool.  
Kirichenko, K. 2003. Benzotriazole - Mediated Carbon-Carbon Bond Formation. Tartu  
Ülikool.  
Tamm, T. 2003. (kaasjuh. Tamm, J.) Quantum chemical modelling of polypyrrole.  
Tartu Ülikool.  
Lomaka, A. 2003. Biomedical Applications of Predictive Computational Chemistry.  
Tartu Ülikool.  
Fara, D. C. 2004. QSPR Modeling of Complexation and Distribution of Organic  
Compounds. Tartu Ülikool.  
Atanasov Dobchev, D. 2006. Robust QSAR Methods for the Prediction of Properties  
from Molecular Structure. Tartu Ülikool.

Slavov, S. H. 2007. Biomedical applications of the QSAR approach. Tartu Ülikool.

Kahn, I. 2007. (kaasjuh. Maran, U.) Quantitative Structure-Activity Relationships of Environmentally Relevant Properties. Tartu Ülikool.

Martin, D. 2011. The QSPR/QSAR approach for the prediction of properties of fullerene derivatives. Tartu Ülikool.

Stoyanova-Slavova, I. 2013. Validation of QSAR/QSPR for regulatory purposes. Tartu Ülikool.

Pillai, G. G. 2015. (kaasjuh. Kaido Tämm). Computational modelling of diverse chemical, biochemical and biomedical properties. Tartu Ülikool.

Luberg, K. 2017, (juh) Tõnis Timmusk, Mati Karelson. Human Tropomyosin-Related Kinase A and B: from Transcript Diversity to Novel Inhibitors (Inimese tropomüosiin-seoselised kinaasid A ja B: transkriptide mitmekesisusest uudsete inhibiitoriteni). Tallinna Tehnikaülikool.

MAGISTRITÖÖD (ainult juhendatute arv): 12

PUBLIKATSIOONID

TEADUSARTIKLID Kokku üle 200 teadusartikli, ülevaate, monograafia või monograafia osa