

# Презентация на тему

---

## «Программное обеспечение компьютера.

## Обзор прикладно ПО в области ХИМИИ»

Разработал: Сумина В.И.  
преподаватель информатики и ИКТ  
ГБОУ СПО «Анжеро-Судженский  
политехнический колледж»

---

---

**Компьютер** – двуединая система, состоящая из **аппаратной части** (технических устройств) и информационной части (**программного обеспечения**):



# Аппаратное обеспечение

---

**Аппаратное обеспечение** (англ. *hardware*) — электронные и механические части вычислительного устройства, входящих в состав системы или сети.

Аппаратное обеспечение включает:

- компьютеры и логические устройства,
- внешние устройства и диагностическую аппаратуру,
- энергетическое оборудование,
- батареи и аккумуляторы.



# Программное обеспечение

---

**Программное обеспечение (ПО)** — совокупность всех программ, хранящихся на всех устройствах долговременной памяти компьютера.



# Системное ПО

---

Системное программное обеспечение — необходимая часть ПО, без которой не может работать компьютер.

Главной частью системного ПО является операционная система (ОС).

Примеры ОС: Mac OS, Windows (XP, Vista, Seven), Linux, Unix.

---



# Операционная система

---

Главной частью системного ПО является операционная система (ОС).


Некоторые ОС: MS-DOS, Windows, Linux.

**Операционная система** — набор программ, управляющих оперативной памятью, процессором, внешними устройствами и файлами, ведущих диалог с пользователем.

ОС работает с пользователем в *интерактивном (диалоговом) режиме*.

.


---



# Системное ПО

---

К системному ПО кроме ОС следует отнести и множество программ *обслуживающего, сервисного характера:*

- ▣ обслуживания дисков (копирование, форматирование, «лечение» и пр.)
  - ▣ сжатия файлов (архиваторы)
  - ▣ борьбы с компьютерными вирусами
- 
- 

# Прикладное ПО

---

Программы, с помощью которых пользователь может решать свои информационные задачи, не прибегая к программированию, называются **прикладными программами (прикладным программным обеспечением)**.

К ним относятся:

- текстовые и графические редакторы;*
- табличные процессоры;*
- системы управления базами данных;*
- коммуникационные (сетевые) программы.*





---

Программы по их юридическому статусу можно разделить на три большие группы:

- *лицензионные,*
- *условно бесплатные (shareware)*
- *свободно распространяемые программы (freeware).*



# Лицензионные программы

---

Дистрибутивы лицензионных программ (диски CD-ROM, с которых производится установка программ на компьютеры пользователей) распространяются разработчиками на основании договоров с пользователями на платной основе, проще говоря, лицензионные программы продаются. Довольно часто разработчики предоставляют существенные скидки при покупке лицензий на использование программы на большом количестве компьютеров или на использование программы в учебных заведениях. В соответствии с лицензионным соглашением разработчики программы гарантируют ее нормальное функционирование в определенной операционной системе и несут за это ответственность.

---



# Условно-бесплатные программы

---

Некоторые фирмы - разработчики программного обеспечения предлагают пользователям условно бесплатные программы в целях их рекламы и продвижения на рынок. Пользователю предоставляется версия программы с ограниченным сроком действия (после истечения указанного срока программа перестает работать, если за нее не произведена оплата) или версия программы с ограниченными функциональными возможностями (в случае оплаты пользователю сообщается код, включающий все функции).



# Свободно распространяемые программы

---

Многие производители программного обеспечения и компьютерного оборудования заинтересованы в широком бесплатном распространении программного обеспечения.

К таким программным средствам можно отнести следующие:

- ▣ новые недоработанные (бета) версии программных продуктов (это позволяет провести их широкое тестирование);
- ▣ программные продукты, являющиеся частью принципиально новых технологий (это позволяет завоевать рынок);
- ▣ дополнения к ранее выпущенным программам, исправляющие найденные ошибки или расширяющие возможности;
- ▣ устаревшие версии программ;
- ▣ драйверы к новым устройствам или улучшенные драйверы к уже существующим.

---

# **Обзор прикладного ПО в области химии**



*Редактирование текстов, содержащих химическую информацию, требует использования специализированных программных инструментов.*

---

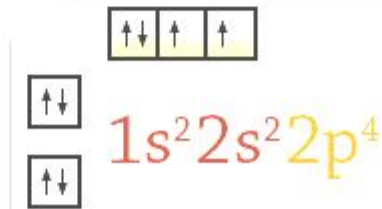
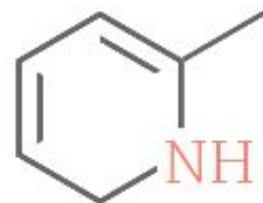
**Химические редакторы** обычно позволяют выполнять следующие функции:

- создавать на экране химические структурные формулы, схемы реакций, лабораторные установки;
- конструировать объемные молекулярные модели и выполнять манипуляции с ними (увеличение или уменьшение моделей, вращение и перемещение их и т.д.);
- рассчитывать энергетические и пространственные параметры системы (распределение электронной плотности, энергию и длину связей, валентные углы и т.п.);
- рассчитывать энергию молекулы в стационарном и возбужденных состояниях на основе классической механической модели осциллирующих атомов;
- рассчитывать другие молекулярные характеристики и вероятность пути прохождения химических реакций.

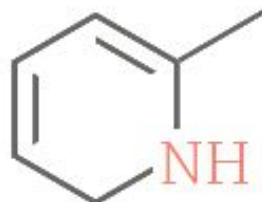




## ChemDraw Pro 11.0.1 (Commercial)

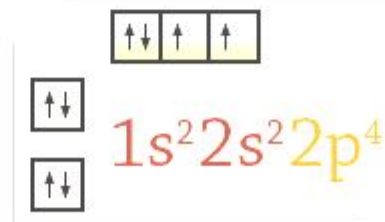


**ChemDraw Pro 11.0.1** – известная программа, позволяющая построить любые химические структуры. Содержит встроенную таблицу Менделеева и множество шаблонов химических структур. Современная версия ChemDraw Pro имеет несколько стилей визуального оформления (так называемые *Темы*), в том числе *I\_Draw Style*, напоминающий известную программу ISIS/Draw (см. ниже). Изменить тему можно в параметрах программы.

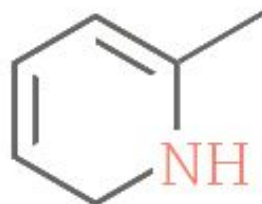




## ISIS Draw (FreeWare)



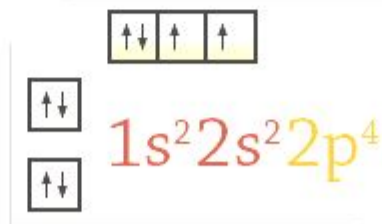
Абсолютно бесплатная программа для рисования структурных формул. Файлы сохраняются в формате \*.skc (Эскиз ISIS/Draw), который легко распознает программа ChemDraw. В свою очередь, с помощью программы ChemDraw легко сохранить файл в формате ISIS/Draw. Таким образом, не происходит потери данных, что очень важно при переносе структур из одного формата в другой (\*.cdx -> \*.skc). Версия 2.5 аналогична версии 2.4, но не содержит дополнений.



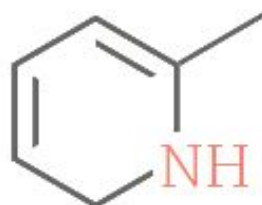


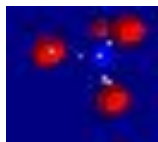


## CarboDraw (FreeWare)

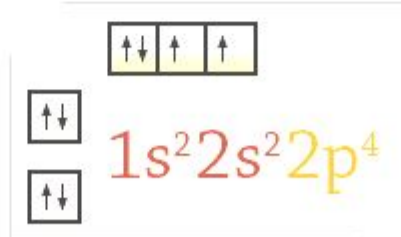
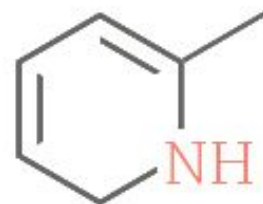


Специальная программа, предназначенная для построения циклических структур углеводов (моно-, олиго- и полисахаридов). Моносахариды можно связывать в цепочки, образуя полисахарид заданного состава. Любой моносахарид можно представить как D или L-изомер. Существует возможность выбора многочисленных заместителей (вместо гидроксильных групп и атомов водорода). Названия моносахаридов задаются автоматически, их также можно отредактировать вручную.

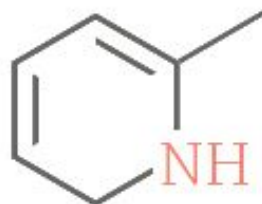




## XtalDraw (FreeWare)

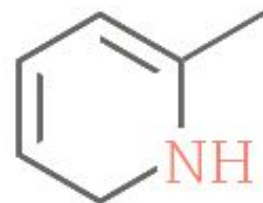


XtalDraw - программа для визуализации кристаллических и молекулярных структур в виде шаростержневых моделей, многогранников и объемных моделей. Программа содержит большой набор файлов данных, поддерживает не только файлы данных XtalDraw, но и американские минералогические базы данных (American Mineralogist Crystal Structure Database). XtalDraw с большой достоверностью показывает, что большинство неорганических веществ имеет немолекулярное строение.

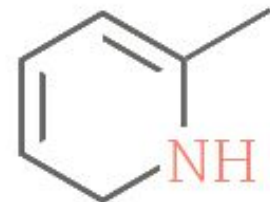
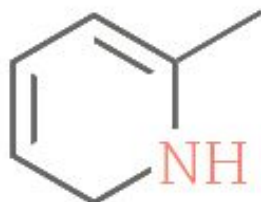




## ChemSite (FreeWare)

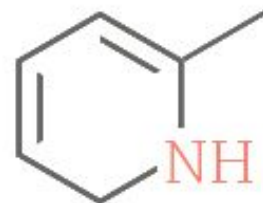


Программа для создания 3D-моделей молекул. В этой программе легко построить структуру любого органического соединения, поскольку она содержит множество инструментов: функциональные группы, аминокислоты, нуклеиновые кислоты, углеводы и др. Каждый структурный фрагмент можно добавить на экран или присоединить к любому атому. Щелчок по кнопке "H" автоматически добавит все атомы водорода. С помощью инструмента "Эскиз" легко построить любую структуру произвольного строения. Программа имеет множество полезных функций и особенностей.

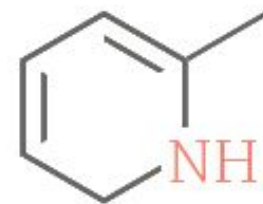
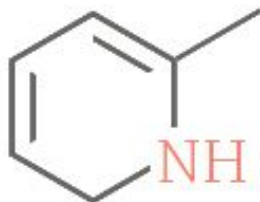




## BestChem (FreeWare)

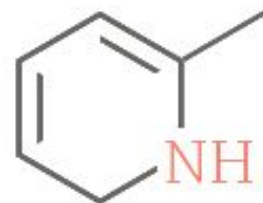


Программа BestChem предназначена для решения разного рода задач по химии. Сюда входят задачи, которые решаются с помощью уравнения химической реакции. Это задачи на расчет по уравнению реакции массы вещества, объема выделившегося газа (в случае наличия газообразных веществ), решение задач на "избыток-недостаток", причем исходные вещества могут быть заданы любыми параметрами. Так же программа умеет решать задачи, в которых задана доля примеси в веществах, а так же дан выход продукта реакции, или масса (объем) полученного вещества. При желании вы можете установить то число символов, до которого будут округляться все полученные результаты.

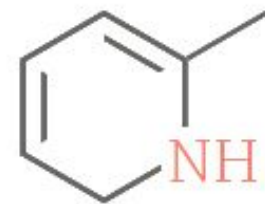
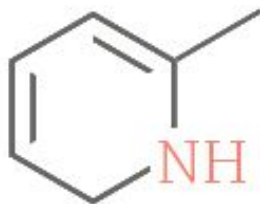




## Готовим растворы (FreeWare)

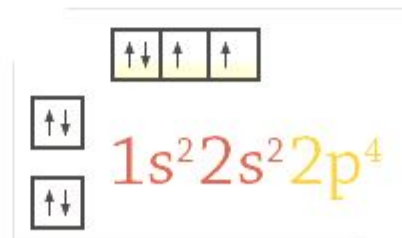


Данная программа предназначена для разного рода работы с растворами, а именно: Приготовление растворов заданного объема и концентрации причем концентрация может быть задана: молярностью, нормальностью, моляльностью, титром, массовой долей. Перерасчет концентрации из одной в другую, перерасчет концентраций при смешивании двух или более растворов (до десяти), разбавление растворов, расчет соотношений двух растворов для получения конечного с известной концентрацией и объемом. В программе присутствуют опции настройки, с помощью вы можете настроить округление полученных результатов, настроить вывод результатов в удобных вам единицах измерения. Программа отличается простым и понятным интерфейсом. В новой версии программы добавлена возможность приготовления буферных растворов, расчет погрешности концентрации, добавлена функция калькулятора, интерфейс программы стал более приятным.



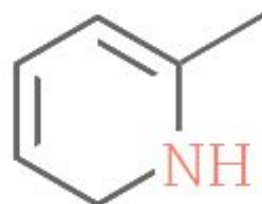


## Molecular Weight Calculator (FreeWare)



Эта программа вычисляет молекулярную массу и процентный состав до 20 веществ одновременно, признает сокращения, определяемые пользователем, и все изотопы. Программа включает Конвертер молей/массы.

Искатель формул, Калькулятор потоков для капилляра, Конвертер обозначений аминокислот, Моделирование фрагментации пептидов и встроенный калькулятор.



# Инструментальное ПО

---

К инструментальному ПО относятся системы программирования.

**Системы программирования** — инструмент для работы программиста.

Существует много языков программирования:

- *Бейсик;*
- *Паскаль;*
- *Фортран;*
- *Си.*

