


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.

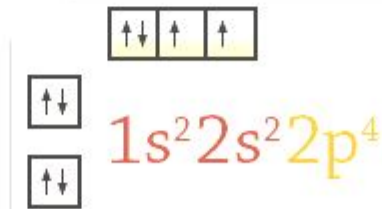
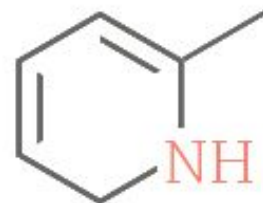
Химические редакторы обычно позволяют выполнять следующие функции:

- 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.

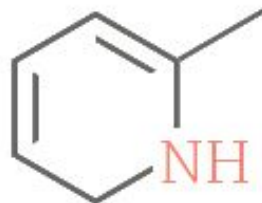




ChemDraw Pro 11.0.1 (Commercial)

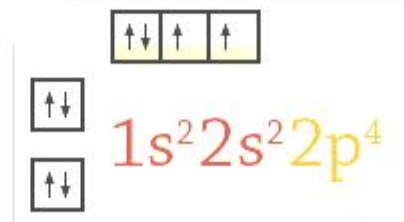


ChemDraw Pro 11.0.1 – известная программа, позволяющая построить любые химические структуры. Содержит встроенную таблицу Менделеева и множество шаблонов химических структур. Современная версия ChemDraw Pro имеет несколько стилей визуального оформления (так называемые *Темы*), в том числе *I_Draw Style*,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

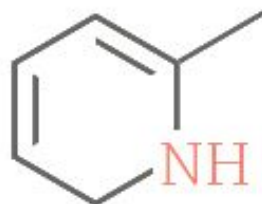




ISIS Draw (FreeWare)

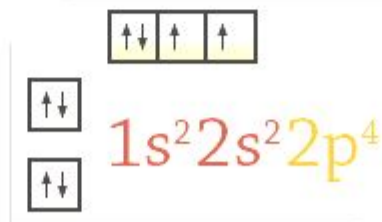


Абсолютно бесплатная программа для рисования структурных формул. Файлы сохраняются в формате *.skc (Эскиз ISIS/Draw), который легко распознает программа ChemDraw. В свою очередь, с помощью программы ChemDraw легко сохранить файл в формате ISIS/Draw. Таким образом, не происходит потери данных, что очень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

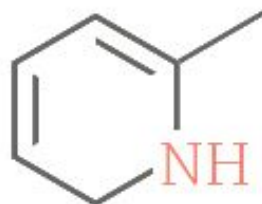


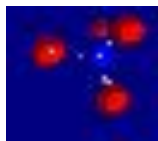


CarboDraw (FreeWare)

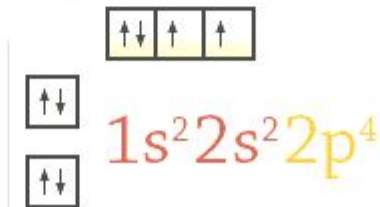


Специальная программа, предназначенная для построения циклических структур углеводов (моно-, олиго- и полисахаридов). Моносахариды можно связывать в цепочки, образуя полисахарид заданного состава. Любой моносахарид можно представить как D или L-изомер. Существует возможность выбора многочисленных заместителей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

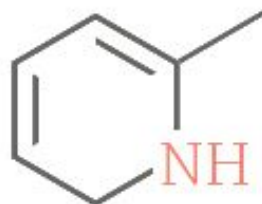




XtalDraw (FreeWare)

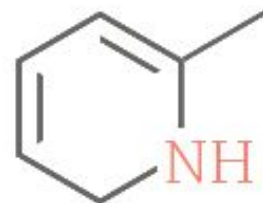


XtalDraw - программа для визуализации кристаллических и молекулярных структур в виде шаростержневых моделей, многогранников и объемных моделей. Программа содержит большой набор файлов данных, поддерживает не только файлы данных XtalDraw, но и американские минералогические базы данных (American Mineralogist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

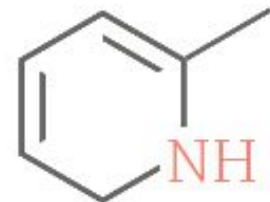
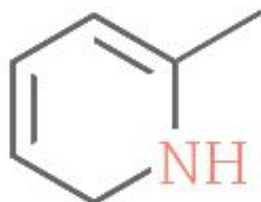




ChemSite (FreeWare)

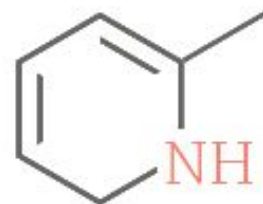


Программа для создания 3D-моделей молекул. В этой программе легко построить структуру любого органического соединения, поскольку она содержит множество инструментов: функциональные группы, аминокислоты, нуклеиновые кислоты, углеводы и др. Каждый структурный фрагмент можно добавить на экран или присоединить 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.

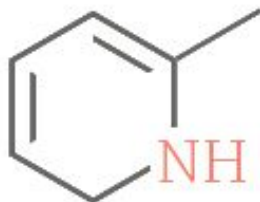




BestChem (FreeWare)

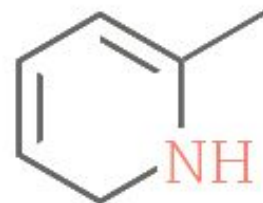


Программа BestChem предназначена для решения разного рода задач по химии. Сюда входят задачи, которые решаются с помощью уравнения химической реакции. Это задачи на расчет по уравнению реакции массы вещества, объема выделившегося газа (в случае наличия газообразных веществ), решение задач на "избыток-недостаток", 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.

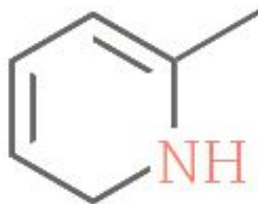




Готовим растворы (FreeWare)

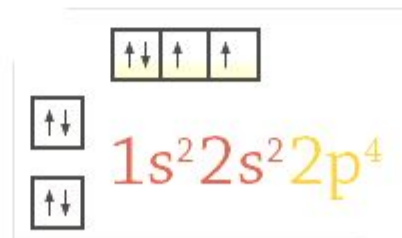
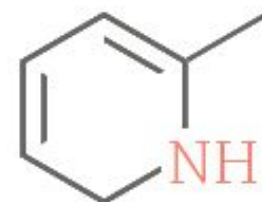


Данная программа предназначена для разного рода работы с растворами, а именно: Приготовление растворов заданного объема и концентрации причем концентрация может быть задана: молярностью, нормальностью, моляльностью, титром, массовой долей. Перерасчет концентрации из одной в другую, перерасчет концентраций 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.*

