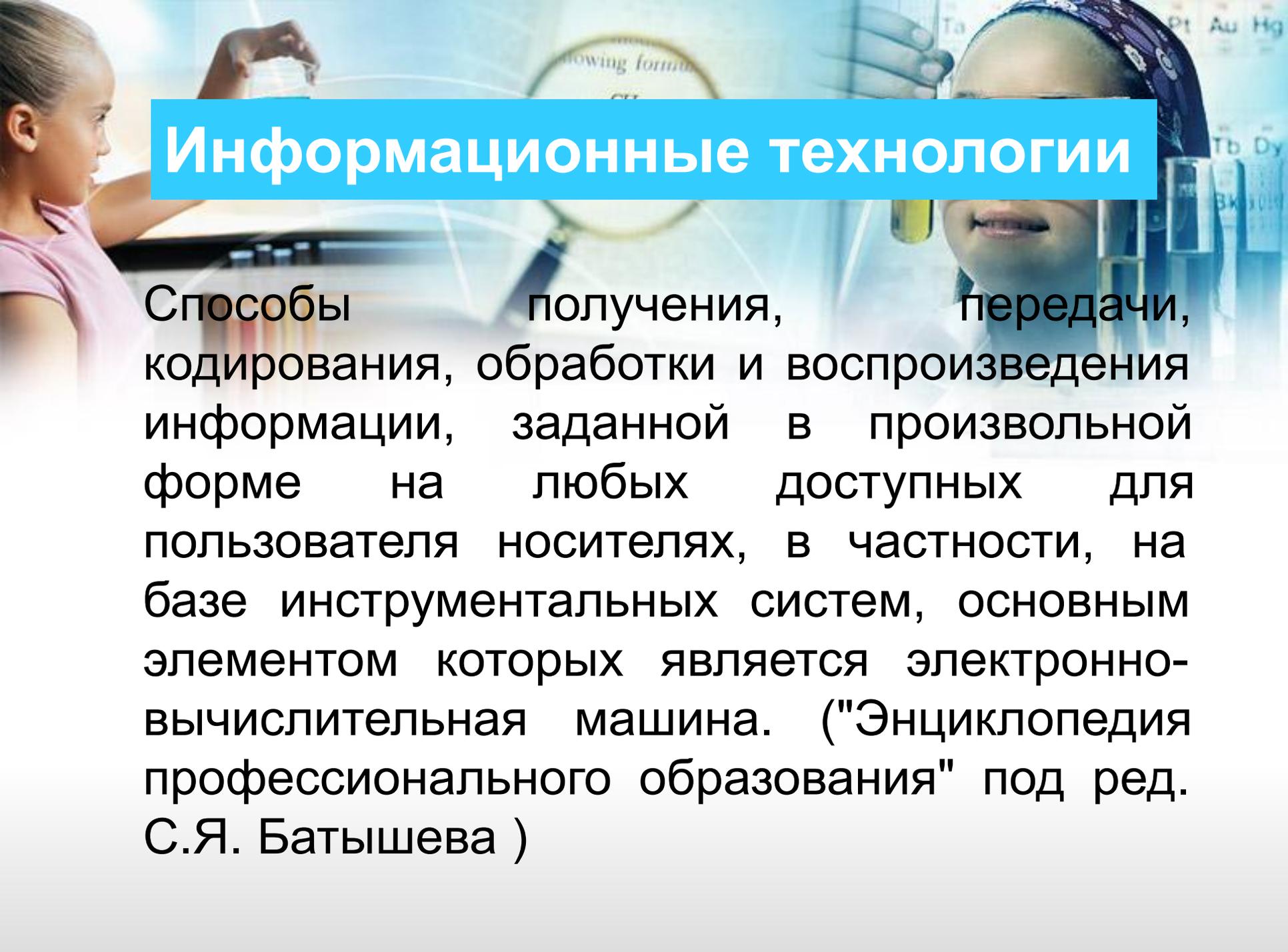




# Использование ИТ в химии

Выполнила:  
аспирантка 2-го г/о ИЦМиМ  
Буйко Ольга



# Информационные технологии

Способы получения, передачи, кодирования, обработки и воспроизведения информации, заданной в произвольной форме на любых доступных для пользователя носителях, в частности, на базе инструментальных систем, основным элементом которых является электронно-вычислительная машина. ("Энциклопедия профессионального образования" под ред. С.Я. Батышева )

# Информационные технологии

Компьютерные технологии контроля знаний

Бескомпьютерные технологии контроля знаний

Бескомпьютерные технологии предъявления информации

Компьютерные технологии предъявления информации

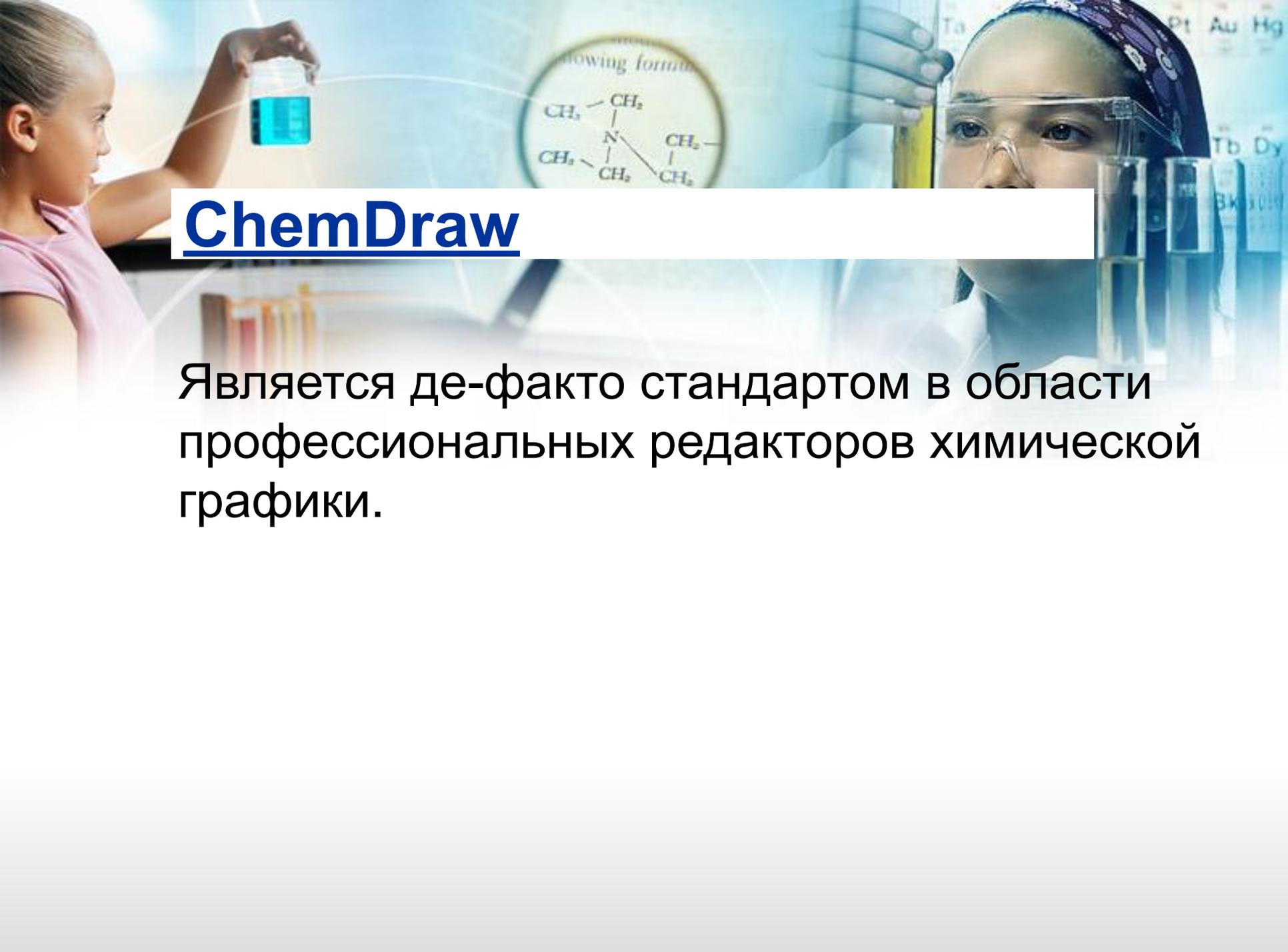
- бумажные
- оптотехнические
- электротехнические

- компьютерные обучающие программы
- мультимедиа
- технологии дистанционного обучения



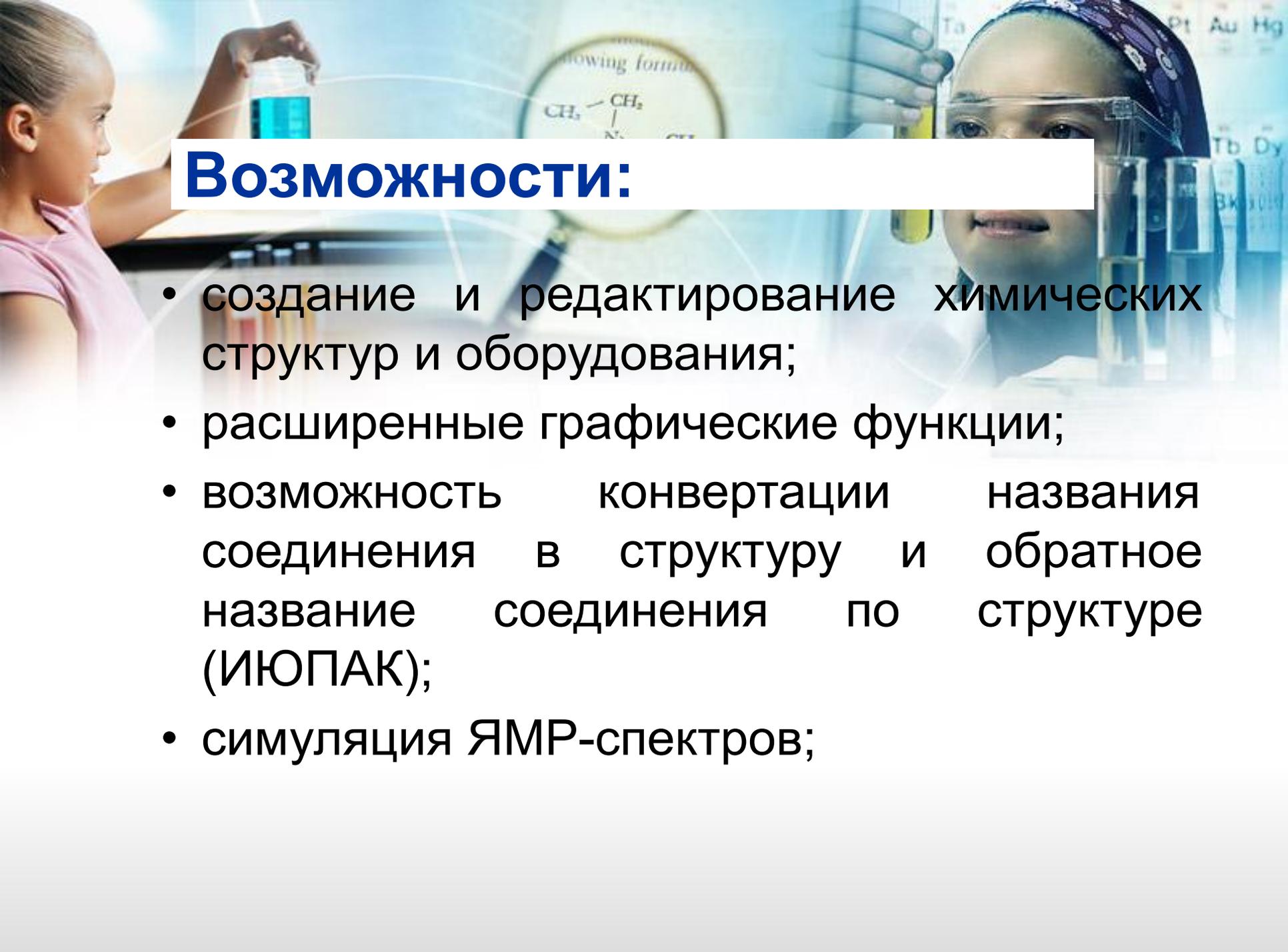
# Технологии мультимедиа в химии

от англ. *multimedia* - многокомпонентная среда, которая позволяет использовать текст, графику, видео и мультипликацию в интерактивном режиме и том самым расширяет рамки применения компьютера в учебном процессе.



# ChemDraw

Является де-факто стандартом в области профессиональных редакторов химической графики.

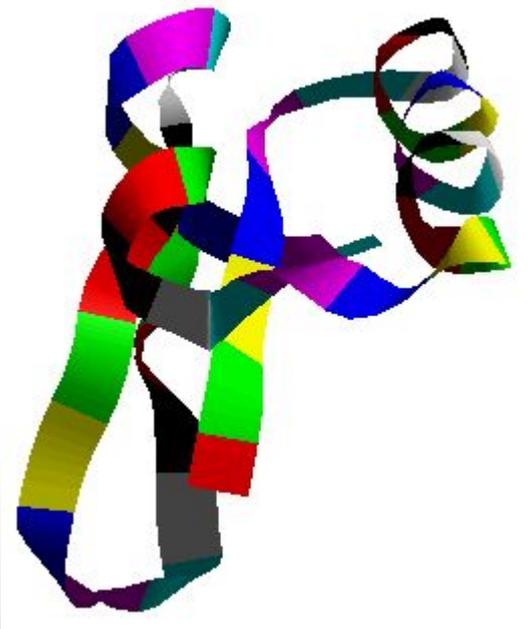
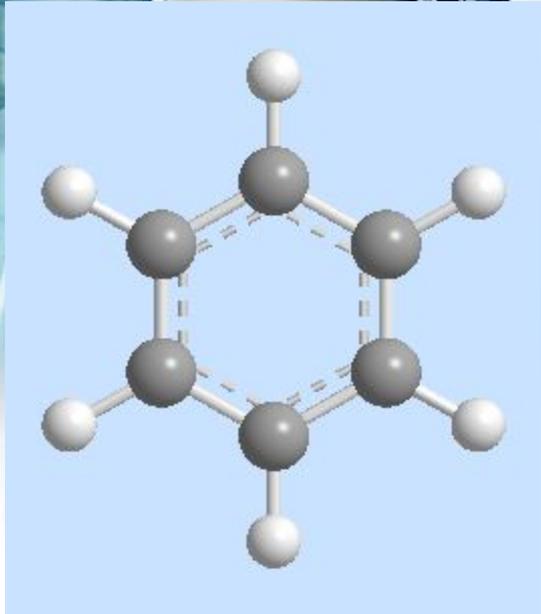
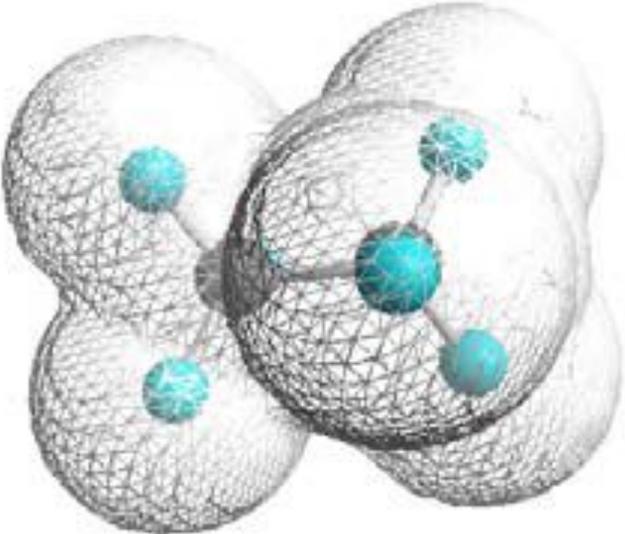
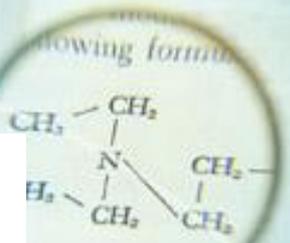
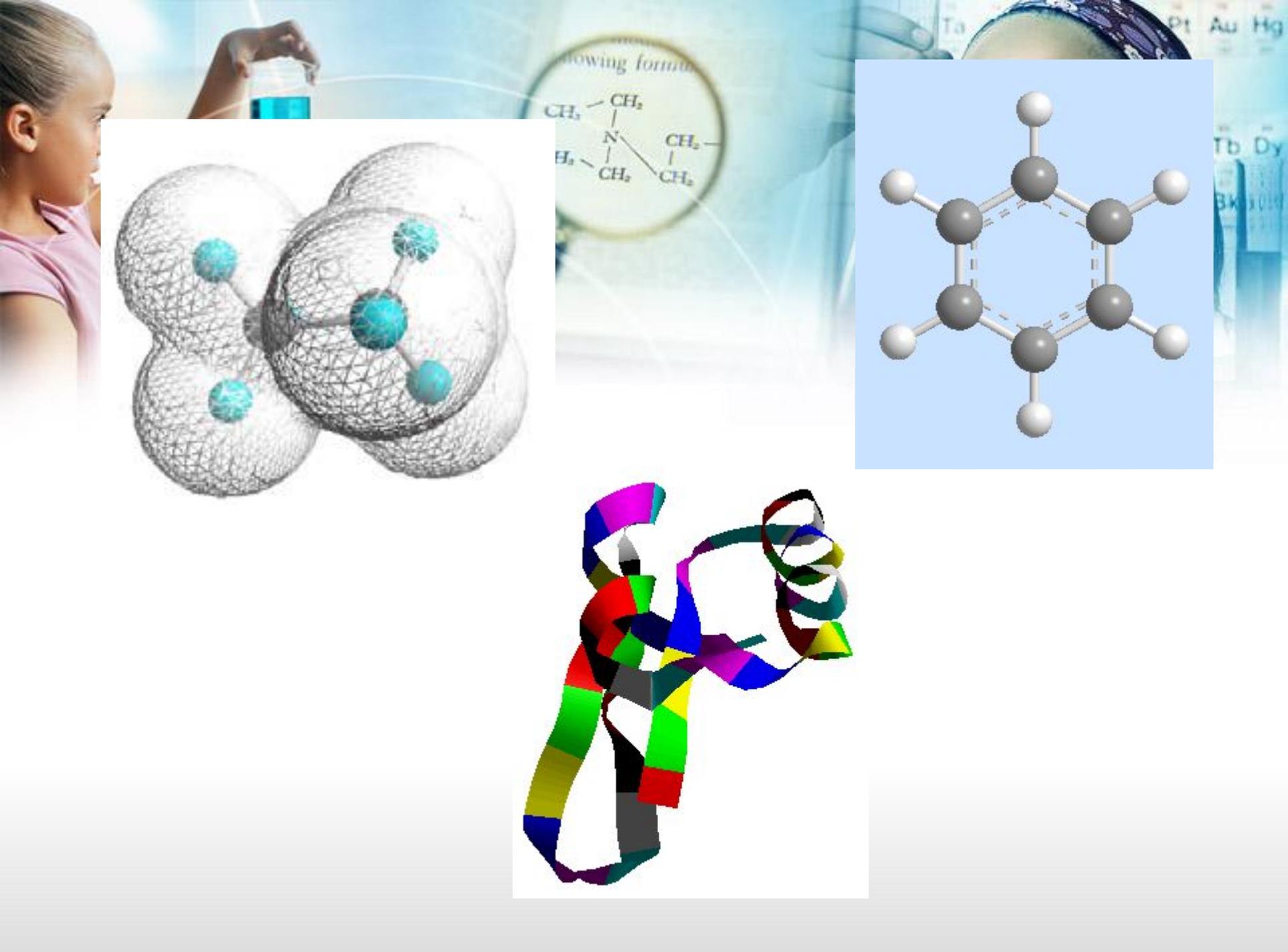


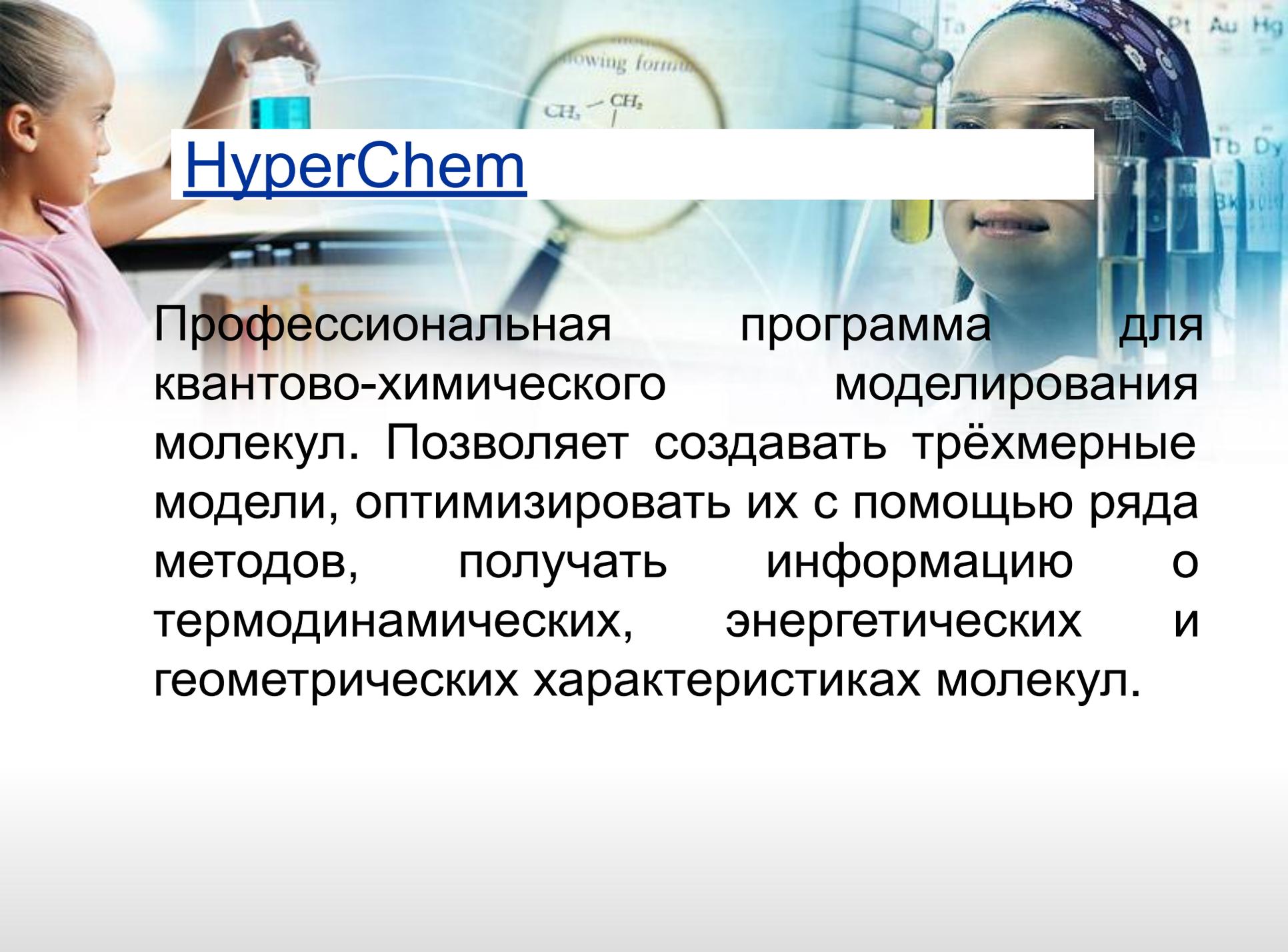
## Возможности:

- создание и редактирование химических структур и оборудования;
- расширенные графические функции;
- возможность конвертации названия соединения в структуру и обратное название соединения по структуре (ИЮПАК);
- симуляция ЯМР-спектров;



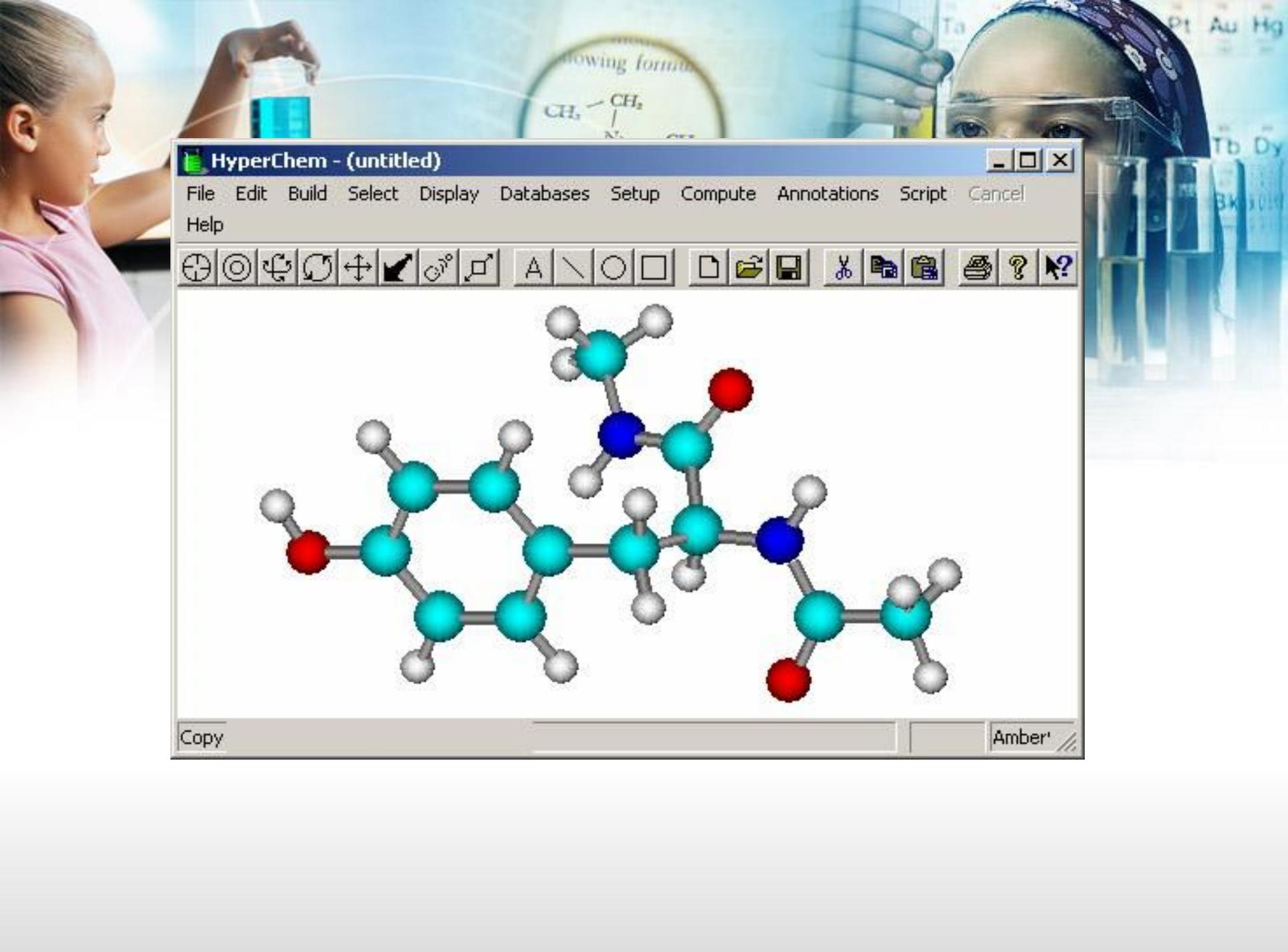
- средства для проверки химических формул и структур;
- большая база шаблонов распространенных макроструктур и оборудования;
- модуль ChemDraw/Excel;
- activeX/Plugin для браузера с возможностью поиска в онлайн-базе данных химических соединений CambridgeSoft.





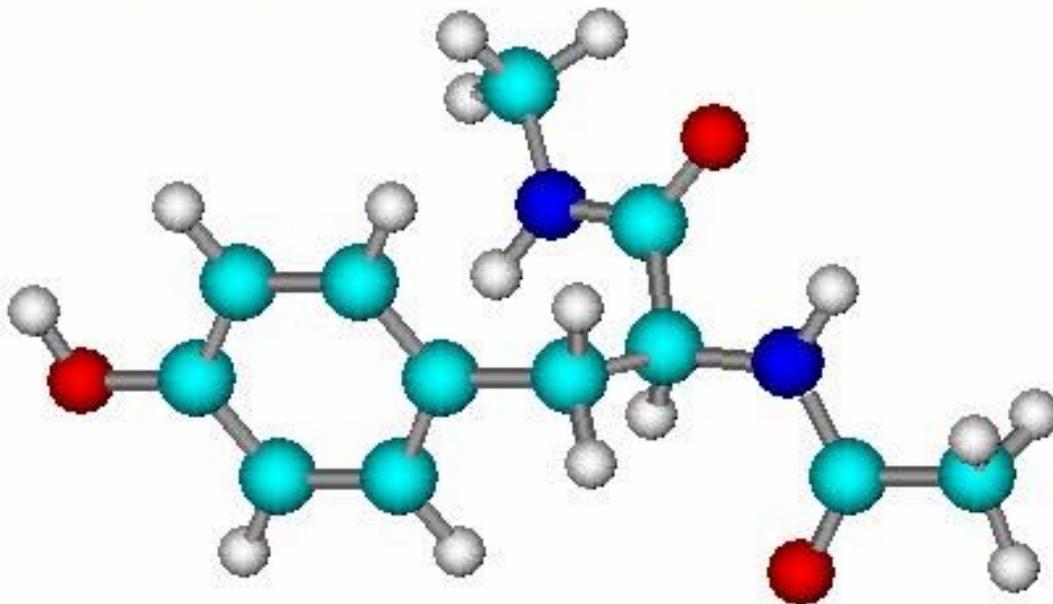
# HyperChem

Профессиональная программа для квантово-химического моделирования молекул. Позволяет создавать трёхмерные модели, оптимизировать их с помощью ряда методов, получать информацию о термодинамических, энергетических и геометрических характеристиках молекул.



HyperChem - (untitled)

File Edit Build Select Display Databases Setup Compute Annotations Script Cancel  
Help



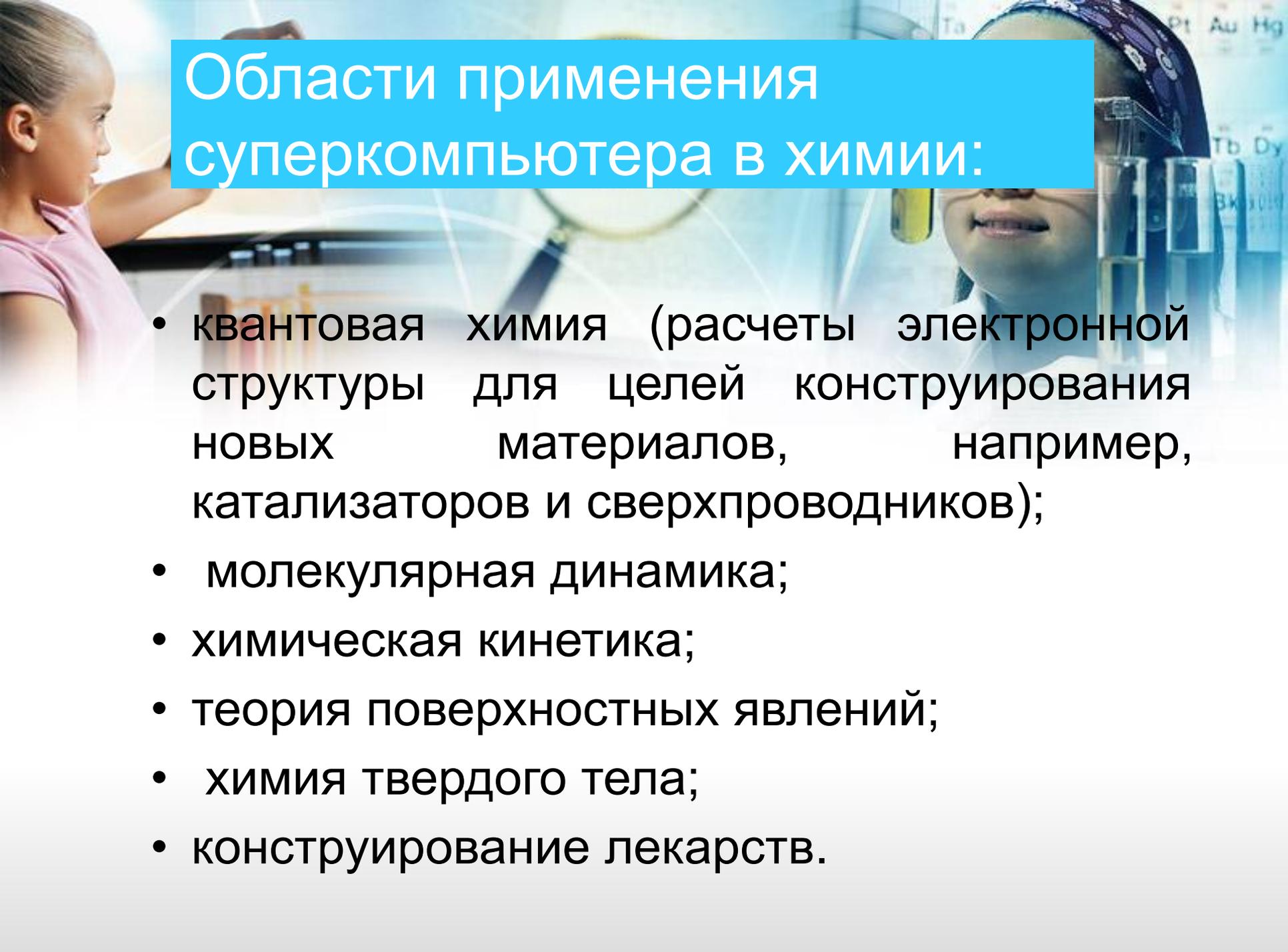
Copy

Amber



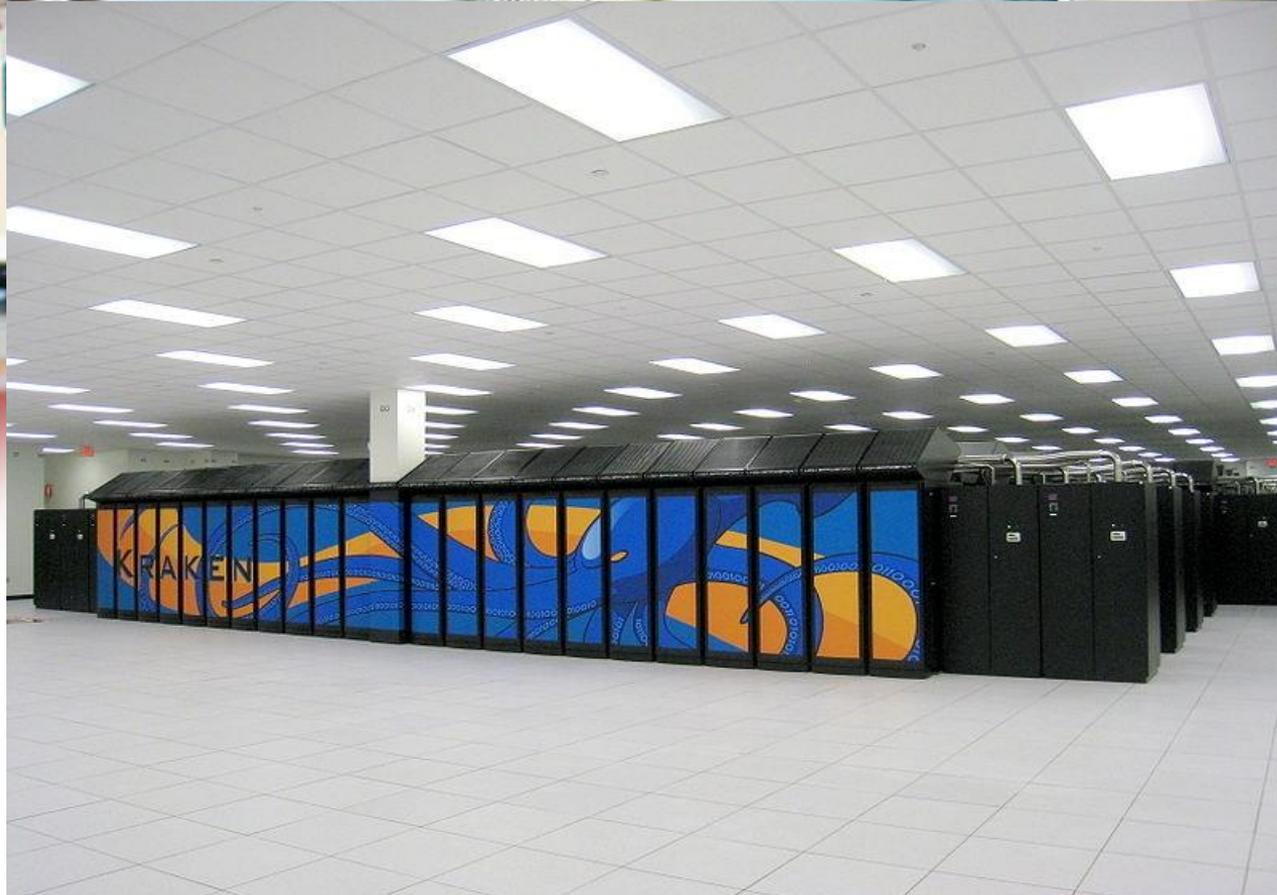
# Современные средства компьютерной техники

- Персональные компьютеры - это вычислительные системы с ресурсами, полностью направленными на обеспечение деятельности одного управленческого работника. Это наиболее многочисленный класс вычислительной техники.
- Суперкомпьютеры представляют собой вычислительные системы с предельными характеристиками вычислительной мощности и информационных ресурсов.



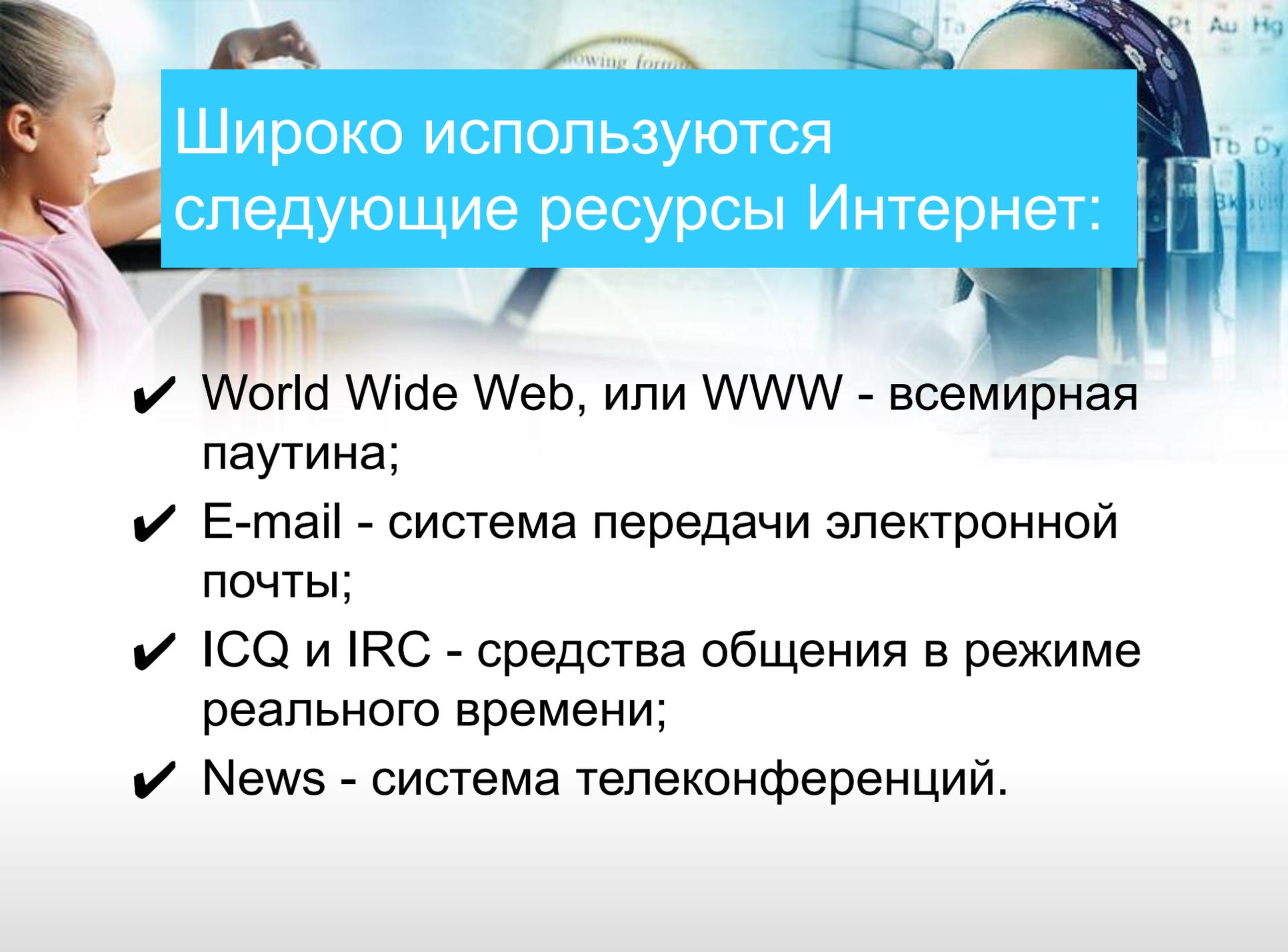
# Области применения суперкомпьютера в химии:

- квантовая химия (расчеты электронной структуры для целей конструирования новых материалов, например, катализаторов и сверхпроводников);
- молекулярная динамика;
- химическая кинетика;
- теория поверхностных явлений;
- химия твердого тела;
- конструирование лекарств.



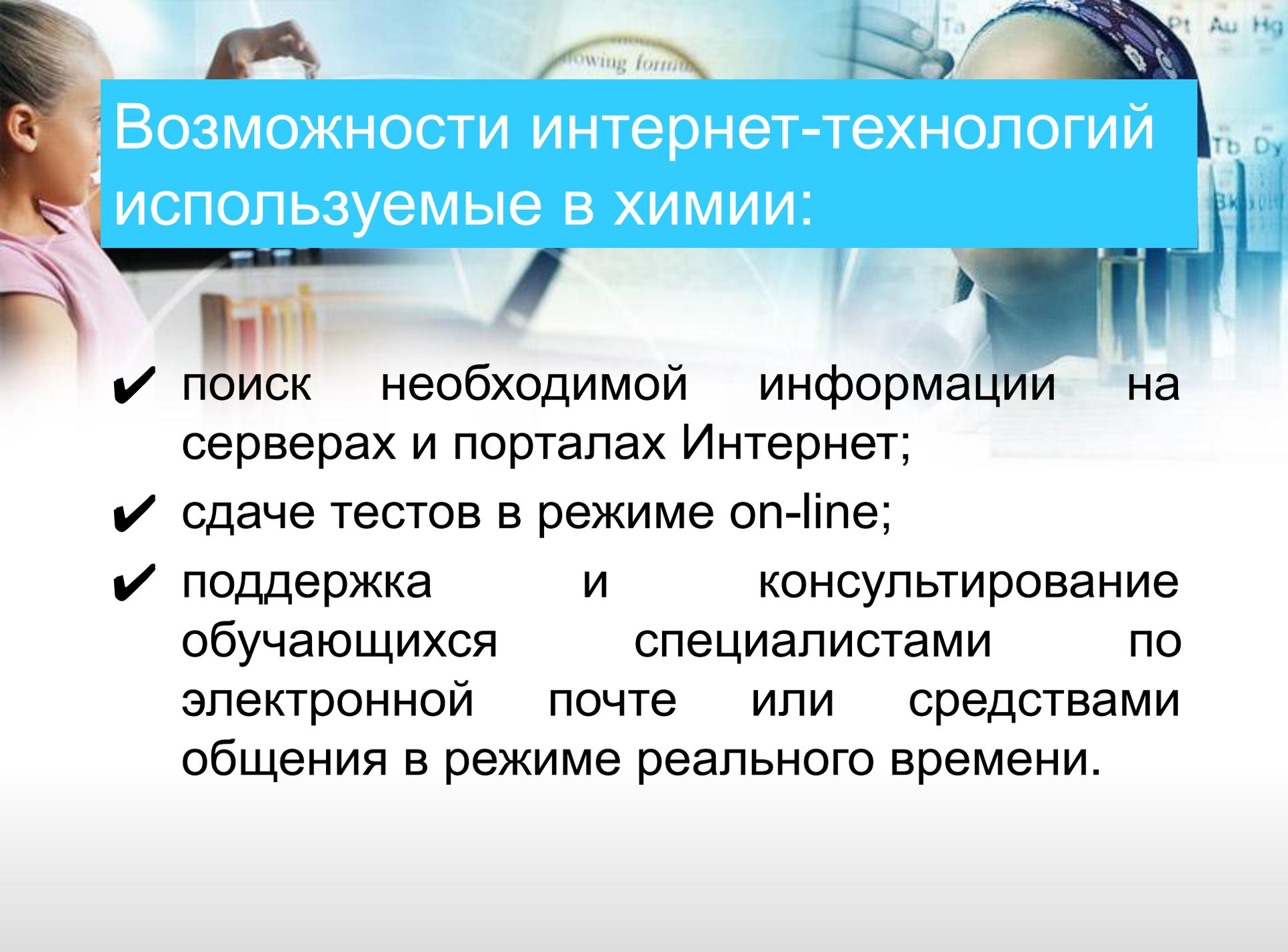
## Kraken

**Национальный институт вычислительных наук при университете в Теннесси, США (2009)  
3-е место в рейтинге TOP500**



## Широко используются следующие ресурсы Интернет:

- ✓ World Wide Web, или WWW - всемирная паутина;
- ✓ E-mail - система передачи электронной почты;
- ✓ ICQ и IRC - средства общения в режиме реального времени;
- ✓ News - система телеконференций.



## Возможности интернет-технологий используемые в химии:

- ✓ поиск необходимой информации на серверах и порталах Интернет;
- ✓ сдаче тестов в режиме on-line;
- ✓ поддержка и консультирование обучающихся специалистами по электронной почте или средствами общения в режиме реального времени.



**Спасибо за внимание!**