

Химия в профессии Компьютерные Сети (КС)

Подготовил
Пятигорец Роман
1КС-17

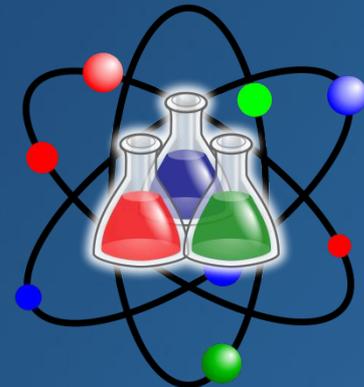
План

- 1. Химия – как наука в общем
- 2. Химия в жизни человека
- 3. Химия в профессии КС

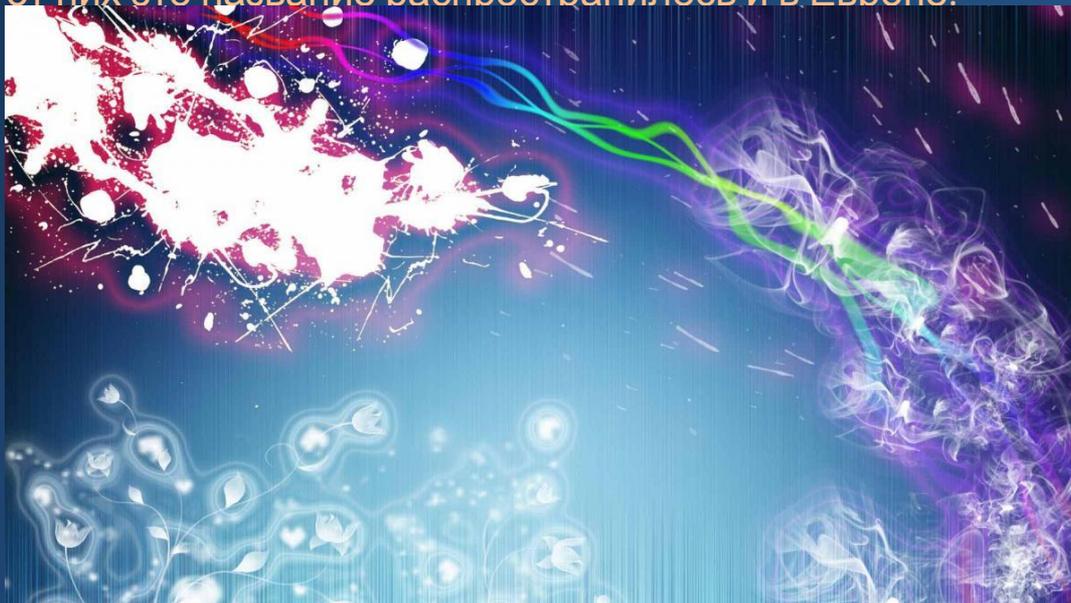


Химия как наука

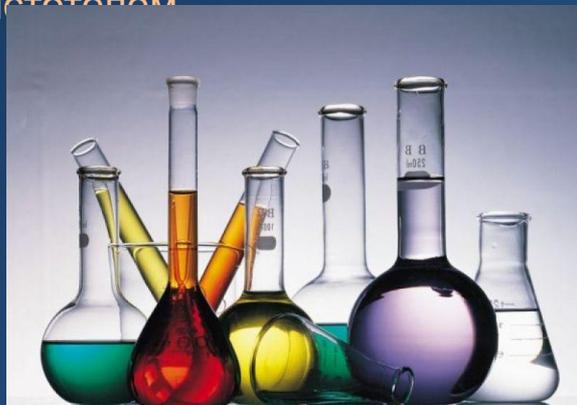
- Химия (от араб. كيمياء, произошедшего, предположительно, от египетского слова km.t (чёрный), откуда возникло также название Египта, «вкус», др.-греч. χυμα — «сплав (металлов)», «литьё», «поток», др.-греч. χυμεισις — «смешивание») — одна из важнейших и обширных областей естествознания, наука о веществах, их составе и строении, их свойствах, зависящих от состава и строения, их превращениях, ведущих к изменению состава — химических реакциях, а также о законах и закономерностях, которым эти превращения подчиняются. Поскольку все вещества состоят из атомов, которые благодаря химическим связям способны формировать молекулы, то химия занимается, прежде всего, рассмотрением перечисленных выше задач на атомно-молекулярном уровне, то есть на уровне химических элементов и их соединений. Химия имеет немало связей с физикой и биологией, по сути граница между ними условна[1], а пограничные области изучаются квантовой химией, химической физикой, физической химией, геохимией, биохимией и другими науками.



- Зачатки химии возникли ещё со времён появления человека. Поскольку человек всегда так или иначе имел дело с химическими веществами, его первые эксперименты с огнём, дублением шкур, приготовлением пищи можно назвать зачатками практической химии. Постепенно практические знания накапливались, и в самом начале развития цивилизации люди умели готовить некоторые краски, эмали, яды и лекарства. Вначале человек использовал биологические процессы, такие, как брожение, гниение; позже, с освоением огня, начал использовать процессы горения, спекания, сплавления. Использовались окислительно-восстановительные реакции, не протекающие в живой природе — например, восстановление металлов из их соединений.
- Такие ремёсла, как металлургия, гончарство, стеклоделие, крашение, парфюмерия, косметика, достигли значительного развития ещё до начала нашей эры. Например, состав современного бутылочного стекла практически не отличается от состава стекла, применявшегося в 4000 году до н. э. в Египте. Хотя химические знания тщательно скрывались жрецами от непосвящённых, они всё равно медленно проникали в другие страны. К европейцам химическая наука попала главным образом от арабов после завоевания ими Испании в 711 году. Они называли эту науку «алхимией», от них это название распространилось и в Европе.

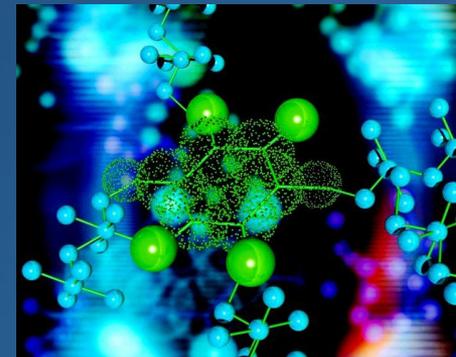
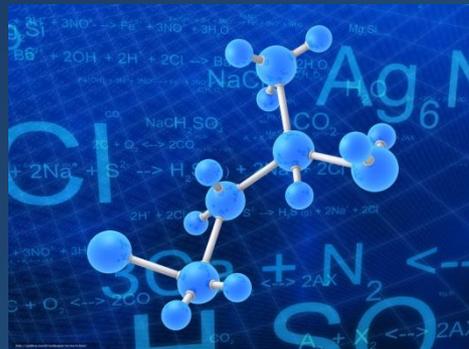


- Известно, что в Египте уже в 3000 году до н. э. умели получать медь из её соединений, используя древесный уголь в качестве восстановителя, а также получали серебро и свинец. Постепенно в Египте и Месопотамии было развито производство бронзы, а в северных странах — железа. Делались также теоретические находки. Например, в Китае с XXII века до н. э. существовала теория об основных элементах (Вода, Огонь, Дерево, Золото, Земля). В Месопотамии возникла идея о противоположностях, из которых построен мир: огонь—вода, тепло—холод, сухость—влажность и т. д.
- В V веке до н. э. в Греции Левкипп и Демокрит развили теорию о строении вещества из атомов. По аналогии со строением письма они заключили, что как речь делится на слова, а слова состоят из букв, так и все вещества состоят из определённых соединений (молекул), которые в свою очередь состоят из неделимых элементов (атомов).
- В V веке до н. э. Эмпедокл предложил считать основными элементами (стихиями) Воду, Огонь, Воздух и Землю. В IV веке до н. э. Платон развил учение Эмпедокла: каждому из этих элементов соответствовал свой цвет и своя правильная пространственная фигура атома, определяющая его свойства: огню — красный цвет и тетраэдр, воде — синий и икосаэдр, земле — зелёный и гексаэдр, воздуху — жёлтый и октаэдр. По мнению Платона, именно из комбинаций этих «кирпичиков» и построен весь материальный мир. Учение о четырёх превращениях унаследовано Аристотелем.



Химия в жизни человека

- Роль химии в современном мире очень велика. На самом деле, химические процессы **окружают нас постоянно**, это касается не только промышленного производства или бытовых моментов.
- Химические реакции в нашем собственном организме протекают **ежесекундно**, разлагая органические вещества до простых соединений вроде углекислого газа и воды, в результате чего мы получаем энергию на совершение элементарных действий.
- Параллельно создаем новые вещества, необходимые для жизнедеятельности и работы всех органов. Останавливаются процессы только **после смерти человека** и его полного разложения.
- Источником питания для многих организмов, в том числе и человека, являются растения, обладающие способностью вырабатывать органические вещества из воды и углекислого газа.
- Этот процесс включает **цепь сложных химических превращений**, итогом которой становится образование биополимеров: клетчатки, крахмала, целлюлозы.

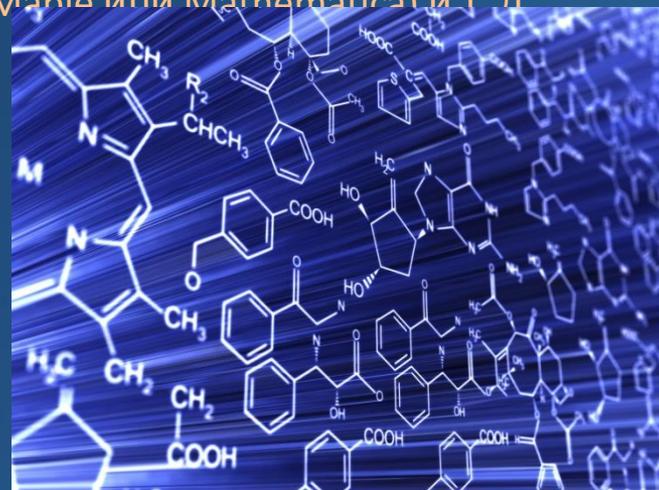
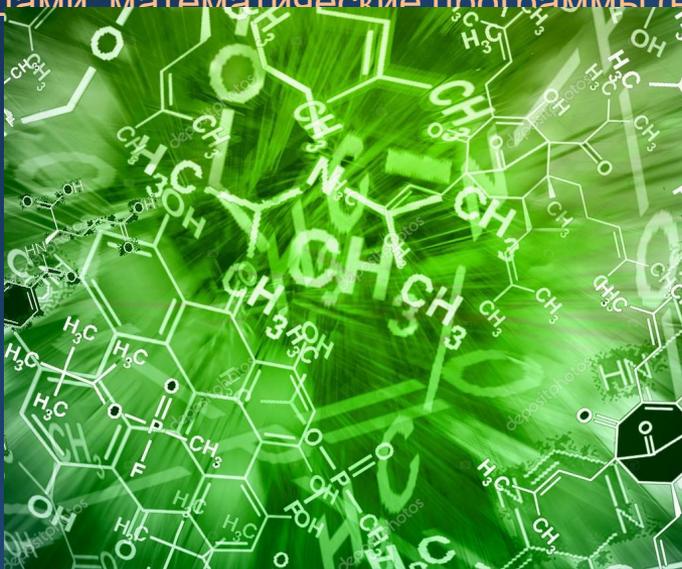


- **Химия в быту**
- Химия в быту человека присутствует ежедневно, мы сталкиваемся с осуществлением целой цепочки химических превращений при:
 - использовании мыла;
 - приготовлении чая с лимоном;
 - гашении соды;
 - поджигании спички или газовой конфорки;
 - приготовлении квашеной капусты;
 - использовании порошков и других моющих средств.
- Все это химические реакции, в ходе которых из одних веществ образуются другие, а человек получает от этого процесса какую-то пользу. Современные порошки содержат ферменты, которые при высоких температурах разлагаются, поэтому стирка в горячей воде нецелесообразна. Эффект отъедания пятен будет минимальным.
- Действие мыла в жесткой воде тоже значительно снижается, зато появляются хлопья на поверхности. Смягчить воду можно кипячением, но иногда это возможно только с помощью химических веществ, которые как раз и добавляют в средства для стиральной машины, снижающие процесс образования накипи.

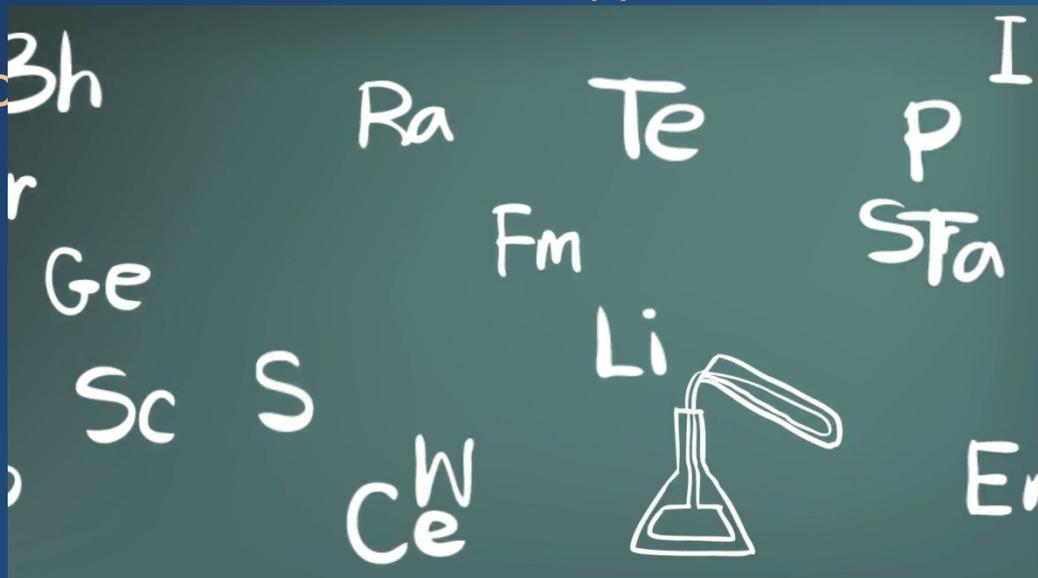


Химия в профессии КС

- Компьютерная химия (математическая химия) — сравнительно молодая область химии, основанная на применении компьютерных методов и дискретной математики, прежде всего [источник не указан 1991 день], теории графов и комбинаторики, к химическим задачам фундаментального и прикладного характера. Исходя из общего определения химии как науки о веществах и превращениях их в друг друга, можно сказать, что вещества (молекулы) моделируются в компьютерной химии молекулярными графами, а превращения веществ (химические реакции) — формальными операциями с графами. Такой подход в ряде случаев заметно упрощает алгоритмизацию химических задач, сводя их к типовым задачам комбинаторики и дискретной математики и позволяет искать решения с помощью компьютерных программ. При этом наряду со специальными программами в компьютерной химии могут применяться и универсальные программы: для работы с таблицами — математические программы (например, Maple или Mathematica) и т. д.



- В качестве примера типовых задач компьютерной химии можно назвать: поиск зависимостей типа «структура — свойство»; генерацию наборов химических структур, отвечающих заданным параметрам (составу, наличию функциональных групп и т. д.); перечисление всевозможных химических реакций между заданными реагентами (так называемый «компьютерный синтез») и т. д. Наряду с общими химическими задачами в компьютерной химии существует также большая группа узкоспециальных задач, тесно связанных с задачами химической информатики, например, задачи распознавания химических структур при обращении к химическим и физико-химическим базам данных. Эта группа задач в свою очередь включает задачи изоморфизма графов.



История

- В период становления и формирования в самостоятельную область новое научное направление нередко получает разные названия у разных авторов. Так произошло и с компьютерной химией: исторически закрепились два названия — «компьютерная химия» и «математическая химия». Так, один из научных журналов, оказавший значительное влияние на становление компьютерной химии, называется «Journal of Mathematical Chemistry».
- Однако название «математическая химия» представляется неудачным [источник не указан 1991 день], если учесть, что многие области химии, сформировавшиеся задолго до появления компьютерной химии, изначально были основаны на математическом фундаменте, например, физическая химия, кинетика и катализ, квантовая химия. При том, что ряд основополагающих работ в компьютерной химии был выполнен во время ЭВМ первых поколений, развитие компьютерной химии стало возможным только с появлением современных компьютеров. Несмотря на то, что сегодня компьютеры используются практически во всех областях современной химии как для теоретических так и для экспериментальных исследований, именно компьютерная химия гораздо больше многих других областей химии зависит от уровня развития компьютерных технологий. Такая зависимость связана прежде всего со спецификой важнейших алгоритмов теории графов, многие из которых имеют экспоненциальную вычислительную сложность — теоретическая оценка времени, затраченного на исполнение алгоритма, является экспоненциальной функцией от размера графа, то есть от количества его вершин и ребер, или говоря общехимическим языком — от числа атомов и химических связей.



- С другой стороны, многие задачи химической информатики (Хемоинформатика), решаемые с помощью методов компьютерной химии, уже по своей постановке невозможны без использования компьютера, например, формирование и эксплуатация компьютерной базы данных по свойствам химических соединений. Необходимо при этом отметить, что сама хемоинформатика возникла задолго до появления компьютеров. Существуют зарекомендовавшие себя и ставшие классическими методы поиска по этим изданиям с применением всевозможных печатных указателей (авторского, предметного, формульного и т. д.), организуемые без привлечения аппарата компьютерной химии. Таким образом, в отличие от компьютерной химии, химическая информатика (Хемоинформатика), как и подавляющее большинство традиционных областей химии, основана на применении докомпьютерных технологий [источник не указан 1991 день]. В этом и заключается основное [источник не указан 1991 день] методологическое отличие компьютерной химии. С известной долей неточности можно утверждать, что если целью большинства химических исследований является установление некоторых химических закономерностей, то целью исследований в компьютерной химии является, как правило, некоторый алгоритм и реализующая его компьютерная программа, позволяющая искать химические закономерности, эксплуатация такой программы может проходить уже вне



Конец