**HyperChem**

[**http://www.molnet.eu/index.php?option=com\_content&view=category&id=35&Itemid=54**](http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=category&id=35&Itemid=54)

**Hyperchem - jeszcze raz od podstaw**

<http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=97%3Ahyperchem-jeszcze-raz-od-podstaw&catid=35%3Ahyperchem&Itemid=54&showall=1>

## Pasek ikon w programie HyperChem

<http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=97%3Ahyperchem-jeszcze-raz-od-podstaw&catid=35%3Ahyperchem&Itemid=54&limitstart=3>

## Hyperchem - Energia - Geometria - Optymalizacja

<http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=81:hyperchem-energia-geometria-optymalizacja-&catid=35:hyperchem&Itemid=54>

## Hyprechem - uruchamianie obliczen

<http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=77:hyprechem-uruchamianie-obliczen&catid=35:hyperchem&Itemid=54>

## Hyprechem - zmiana sposobu wyswietlania cząsteczek

<http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=76:hyprechem-zmiana-sposobu-wyswietlania-czsteczek&catid=35:hyperchem&Itemid=54>

**Pasek ikon w programie HyperChem**

 Podstawowe funkcje związane z rysowaniem cząsteczki w programie i jej oglądaniem zawarte są w pasku ikonek przedstawionym poniżej:



* Pierwsza od lewej strony ikona Draw, służy do rysowania wzorów. Przypominam, że aby zmienić rysowany atom musimy wybrać go z układu okresowego dostępnego po wybraniu polecenia Build  Dafalut element? Jeśli chcemy narysować podwójne wiązanie C=C musimy dwukrotnie kliknąć na wiązaniu (analogicznie wprowadzamy wiązanie potrójne CC)[1](http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=97%3Ahyperchem-jeszcze-raz-od-podstaw&catid=35%3Ahyperchem&Itemid=54&limitstart=3" \l "sdfootnote17sym" \o "sdfootnote17anc). Jeśli chcemy natomiast wymazać atom lub usunąć wiązanie, klikamy na danym obiekcie prawym przyciskiem myszki.
* Druga ikona Select, umożliwia nam zaznaczenie atomów i wiązań. Jest to nie tylko użyteczne, gdy chcemy sprawdzić odległość między atomami, ale gdy chcemy np. usunąć kilka elementów wystarczy zaznaczyć je narzędziem Select i nacisnąć klawisz Delete.
* Kolejne sześć ikonek służy do manipulacji na ekranie narysowaną cząsteczką. Kolejnymi ikonami możemy ją obracać, okręcać, przesuwać, przesuwać wzdłuż osi Z (do przodu i do tyłu), powiększać oraz ustawiać płaszczyznę Z[2](http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=97%3Ahyperchem-jeszcze-raz-od-podstaw&catid=35%3Ahyperchem&Itemid=54&limitstart=3" \l "sdfootnote18sym" \o "sdfootnote18anc).
* Cztery zgrupowane ikonki, zaczynające się od obrazku z literą A, służą do nanoszenia na obrazie przestrzennym cząsteczki adnotacji tekstowych, dorysowywania dodatkowych linii, okręgów i prostokątów (kolor ustawiamy poprzez menu Annotation w górnym pasku). Ikonki te są użyteczne, gdy chcemy nanieść na rysunek dodatkowe informacje.
* Dzięki kolejnym trzem ikonkom możemy na szybko wyczyścić pole na którym pracujemy (stworzyć nowy projekt), otworzyć lub zapisać rysunek.
* Ikonka z nożyczkami i dwie następne ułatwiają pracę ze schowkiem ? aby skopiować zawartość ekranu do schowka jako bitmapę w HyperChemie należy użyć polecenia Edit  Copy Image (skrót poprzez klawisz F9).
* Ostatnie trzy ikonki zgrupowane razem pozwalają na szybki wydruk zawartości ekranu oraz skorzystanie z plików pomocy.

**Widok cząsteczki**

 Z matematycznego punktu widzenia, standardowo cząsteczka w HyperChemie przedstawiana jest jako graf przestrzenny (składający się z odcinków). Punkty w których stykają się odcinki (węzły sieci) symbolizują atomy, natomiast długości poszczególnych odcinków, odpowiadają odległościom pomiędzy atomami (długościom wiązań). Czasem jednak czytelniej przedstawić cząsteczkę w innej formie. Możemy to zrobić korzystając
z menu Display, którego widok przedstawiłem poniżej:



Zaczynając od dołu menu, możemy poprzez polecenie Element Color? indywidualnie zdefiniować kolory, w jakim będą wyświetlane na ekranie poszczególne pierwiastki[1](http://www.molnet.eu/index.php?option=com_content&view=article&id=97%3Ahyperchem-jeszcze-raz-od-podstaw&catid=35%3Ahyperchem&Itemid=54&limitstart=3" \l "sdfootnote19sym" \o "sdfootnote19anc). Poprzez polecenie Labels? możemy natomiast określić między innymi, czy i w jaki sposób mają być podpisywane poszczególne atomy. Powyżej w menu Display możemy ustawić jakie elementy mają być wyświetlane na ekranie (ja zaznaczyłem że mają być pokazywane atomy wodoru, wiązania wielokrotne, pierścienie aromatyczne mają być przedstawiane w formie okręgów
i mają być pokazywane wiązania tworzone przez atomy wodoru).