

HyperChem

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

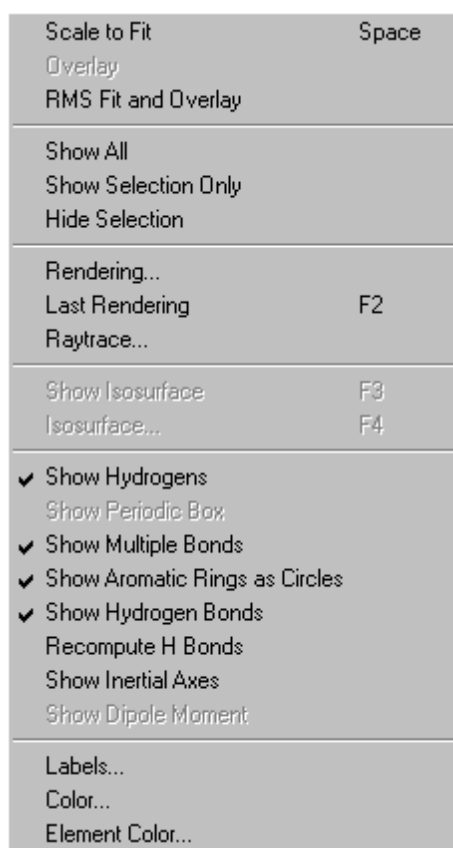
Podstawowe funkcje związane z rysowaniem cząsteczki w programie i jej oglądaniem zawarte są w pasku ikon przedstawionym poniżej:



- 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 . Jeśli chcemy narysować podwójne wiązanie C=C musimy dwukrotnie kliknąć na wiązaniu (analogicznie wprowadzamy wiązanie potrójne C≡C¹). 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 ikon 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 Z².
- 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.
- Ikona 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 pierwiastki¹. 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 zazaczyłem 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).