Bài 1 Bắt đầu sử dụng phần mềm

Nhấp chuột vào biểu tượng HyperChem, màn hình làm việc hiện lên như sau:



Thanh tiêu đề (title bar)

Biểu diễn tên file đang biểu diễn trên cửa sổ. Nếu chưa lưu file thì tên sẽ là untitled

Thanh công cụ lựa chọn (menu bar)

Chứa các công cụ tính toán khác: File, Edit (hiệu chỉnh), Build (xây dựng), Databases (dữ liệu), Setup (đặt phương pháp tính), Compute (tính toán), Annotations (ghi chú, diễn giải), cancel (thoát), Script, và Help (trợ giúp).

Thanh biểu tượng công cụ (tool bar)

Chứa các công cụ cho phép ta vẽ, chọn, biểu diễn, và di chuyển các nguyên tử, phân tử. Phần bên phải thanh công cụ có chứa các công cụ giúp ta ghi chú thêm, lưu nhanh, cắt, dán, in, trợ giúp.

Màn làm việc (workspace)

Là nơi biểu diễn hệ phân tử hiện tại.

Dòng hiện trạng tính toán (status line)

Cho ta biết thông tin như là số nguyên tử trong một phân tử, hiện trạng tính toán, giá trị tính toán

Trợ giúp (help)

Chứa các hướng dẫn thêm cho người sử dụng.

Cách sử dụng chuột:

Muốn thao tác trên công cụ nào ta chỉ việc nhấp trái chuột (L-Click) vào biểu tượng công cụ đó.

Ví dụ muốn sử dụng công cụ vẽ, ta di chuyển biểu tượng chuột đến biểu tượng đó và nhấp chuột:

Sử dụng bàn phím

Thay vì phải dùng chuột ta có thể dùng bàn phím để di chuyển đến những lựa chọn cần thiết. Ví dụ để mở select menu ta nhấn đồng thời hai phím [Alt] + [S] ([Alt] và [S]). Để chọn các lựa chọn khác trong hộp thoại ta nhấp tiếp vào ký tự tắt được gạch dưới trong mỗi lựa chọn. Ví dụ để chọn tiếp s<u>e</u>lect all ta nhấp chữ e trên bàn phím.



Các phím tắt khác:

- Ctrl + N Tạo trang làm việc mới
- Ctrl + O Mở file
- Ctrl + S Lưu file (save) trong File menu
- Ctrl + X Cắt (cut) trong File menu
- Ctrl + C Copy (copy) trong Edit menu
- Ctrl + V Dán (paste) trong Edit menu
- Alt + F4 Thoát khỏi HyperChem
- Ctrl + D Xoá (delete) trong Annotations menu
- Ctrl + K Lựa chọn tiếp (select next) trong Annotations menu
- Ctrl + L Lựa chọn phần trước (select previous) trong Annotations menu
- Ctrl + F Di chuyển tiếp (move forward) trong Annotations menu
- Ctrl + B Di chuyển trở lại (move backward) trong Annotations menu
- Spacebar Di chuyển hệ phân tử vào trung tâm và biểu diễn theo tỷ lệ màn làm việc.
- F2 Trả lại kiểu biểu diễn lúc trước (last rendering) trong Display menu
- F9 Copy hình ảnh (copy image) trong Edit menu
- Esc Như mục thoát (cancel) trên thanh công cụ

Các công cụ quan trọng trên thanh cộng cụ



Các thao tác trên HyperChem

Mở một file ví dụ: Ví dụ mở file có đuôi HIN.

- 1. Di chuyển con trỏ chuột đến File trên thanh công cụ.
- 2. Nhấp trái chuột (L-click) vào File màn hình sẽ hiện ra như sau:



3. Nhấp trái chuột vào Open. Màn hình sẽ hiện ra như sau:

Open File			? ×
Look ja 🔛	Aromatic	- 1	
Anthrapa	🖳 C540	Naphthacana	🗷 Tetrahal
Anthracene	CS0	Naphthal (2) Naphthal	Tetrahelice
Benzene T C190	El Cousere	C Phonacth	T Tetraphe
C 20	Constraine	C Phononthrene	Tipheny
🗷 C240	💽 Naphihac	💽 Pyrana	🗷 Tipheryle
1			000000
File geme			<u>Open</u>
Files of type: Hy	perChem (*.HIN)	*	Cancel
Cogments			
			-
			8
			¥*

4. Nếu màn hình list vẫn còn các chất khác, có thể kéo thanh trượt để tìm kiếm.

Name	Size	Type	Modified 🔺	1	
Anthrace	2KB	HIN File	2/19/96 3:10 PM 🚽		thanh trutot
🚨 Benzene	1 K.B	HIN File	2/19/96 3:39 PM		anna a aòr
🛋 C190	13KB	HIN File	2/28/96 5:20 PM		
🛋 C20	2KB	HIN File	2/28/96 5:22 PM		
🛋 C240	17KB	HIN File	2/28/96 5:20 PM	5 C	
🛋 C540	37KB	HIN File	2/23/95 5 27 PM	1	
4					

Để kéo thanh trượt ta nhấp trái biểu tượng chuột vào thanh trượt, giữ nguyên như thế và rê chuột theo chiều muốn kéo.

5. Muốn mở file nào ta chỉ cần nhấp trái (L-click) chuột vào file đó rồi nhấn tiếp vào nút Open trên list

Open File					? ×
Look jn	🔄 Arone	(ic		- 🗈 (- B
Name		5 ize	Тура	Me	dified 🔺
🔳 C180		13KB	HN Fie	2/	28/96 5:20 PM
🛋 C20		2KB	HIN File	2/	28/96 5:22 PM
💽 C240		17KB	HIN File	24	28/96 5:20 PM
🔳 C540		37KB	HIN Fie	27	28/96 5:21 PM
23 050		4KB	HIN File	2/	15/96 3:39 PM
🔳 C80		6KB	HIN File	2/	28/96 5:20 PM
•					
File game:	050				<u>O</u> pen
Files of type:	HyperChe	an (SHIN)		۲	Cancel
Cogments					
Buckminsterf	ullerene				-
					2

Trên màn hình sẽ hiện ra phân tử chứa trong file



Cách sử dụng Display Settings

Display settings chứa các lựa chọn để biểu diễn hệ phân tử trên trang làm việc

Để mở Display menu ta thực hiện như sau

1. Nhấp trái chuột vào biểu tượng Display trên thanh công cụ. Màn hình khi đó hiện ra như sau:



Sử dụng nhãn (Labels)

Nhấp trái chuột vào Labels trong Display. Hộp thoại Labels hiện ra với các lựa chọn khác nhau, ta có thể lựa chọn hình thức nhãn biểu hiện của các nguyên tử trong hệ.

Labels	×
Atome Symbol Symbol Name Number C Type C Eporpe Spin Population Mass C Basis Set C Chirality C BMS Gradient C Custom	Rexidues © Nong © Ngme © Seguence © Name±Seq Bonds © None © Bond Length © Bond <u>L</u> ength © Bond <u>D</u> ider <u>O</u> K <u>C</u> ancel

Atoms

None	Bỏ tất cả các nhãn.	
Symbol	Biểu tượng nguyên tử, ví dụ C, O, N	
Name	Tên của nguyên tử theo ngân hàng dữ liệu, ví dụ	
	CA, CB đối với cacbon alpha và beta.	
Number	Số thứ tự tạo nguyên tử.	
Туре	Kiểu nguyên tử, theo tác động của trường lực, ví	
	dụ CT đối với cacbon tứ diện trong trường lực	
	AMBER.	
Charge	Điện tích thực của nguyên tử.	
Spin	Tổng spin thực (alpha-beta) của một nguyên tử	
Poputation		
Mass	Khối lượng nguyên tử	
Basis set	Tập hợp hàm cơ bản áp dụng cho nguyên tử	
Chirality	R hoặc S	
RMS Gradient	Gía trị vô hướng của vectơ biến thiên mô tả trường	
	lực trên một nguyên tử.	
Custom	Đặt tuỳ chọn.	
Residues		
None	Bỏ tất cả các nhãn.	
Name	Tên hợp phần, ví dụ: TRP, ILE.	
Sequence	Thứ tự hợp phần từ hợp phần đuôi N (N-	
	teminus).1,2,3	
Name+Seq	Cả tên lẫn thứ tự.	
Bonds		

Hướng dẫn sử dụng HyperChem 7.04

NoneBỏ tất cả các nhãnBond LengthĐộ dài liên kết giữa các nguyên tửBond OrderThứ tự liên kết tính toán theo cơ học lượng tử.

Hình thức biểu diễn phân tử:

Ta hoàn toàn có thể biểu diễn các phân tử khác nhau trong hệ.

Thay đổi hình thức biểu diễn:

1. Nhấp trái chuột vào Rendering trong Display menu Hộp thoại lựa chọn hiện ra như sau:



Nhấp trái chuột vào một trong những hình thức biểu diễn, ví dụ chọn Balls and Cylinders (kiểu hình cầu và hình trụ) thì trên mà hình các nguyên tử của hệ được biểu diễn dưới dạng hình cầu, liên kết dạng hình trụ như sau: Hướng dẫn sử dụng HyperChem 7.04



Chú ý: HyperChem còn có các kiểu biểu diễn khác:

- Sticks: Kiểu que.
- Balls : Kiểu hình cầu.
- Overlapping Spheres: Kiểu hình cầu chồng lên nhau.
- Dots: Kiểu chấm.
- Sticks & Dots: Kiểu chấm gạch.

Đặt mầu nền trang làm việc

Để đặt màu nền trang làm việc ta làm như sau:

- 1. Nhấp trái chuột tích chọn Preferences trong File menu.
- 2. Tích chọn mục Window Color trong hộp thoại Preferences. Màu ngầm định cho trang làm việc của HyperChem là màu đen:

references		? :
Setup Image	Isosurface Colors Paths N	letwork License
Window Color	Band Color Selection Color C Blac C Blac C Gran C Gran C Gran C Gran C Gran C Yelow C Yelow C Yelow	Tool Key
		1

3. Tích chọn White rồi nhấp OK để xem biểu diễn màu nền của màn làm việc. Màu nền lúc này là màu trắng:



Chú ý: Nếu ta đặt màu khác thì nền sẽ có màu khác:

- Black: Màu đen.
- Blue: Màu xanh nước biển.
- Green: Màu xanh da trời.
- Cyan: Màu lục lam.
- Red: Màu đỏ.
- Violet: Màu tía.
- Yellow: Màu vàng.
- White: Màu trắng.

Đặt màu sắc liên kết trong phân tử

1. Tích chọn Preferences trong File menu.