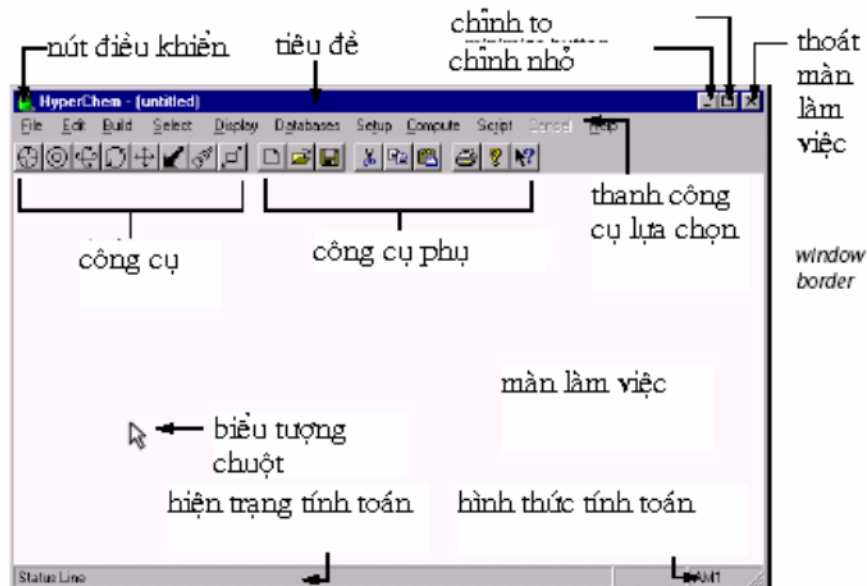


HƯỚNG DẪN SỬ DỤNG HYPERCHEM 7.04

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:

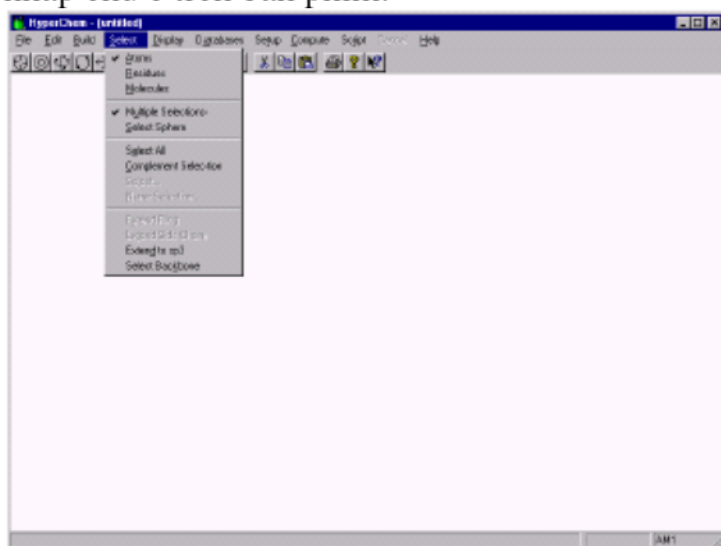
Muốn thao tác trên công cụ nào ta chỉ việc nhấp trái chuột (L-Click) vào biểu tượng công cụ đó.

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

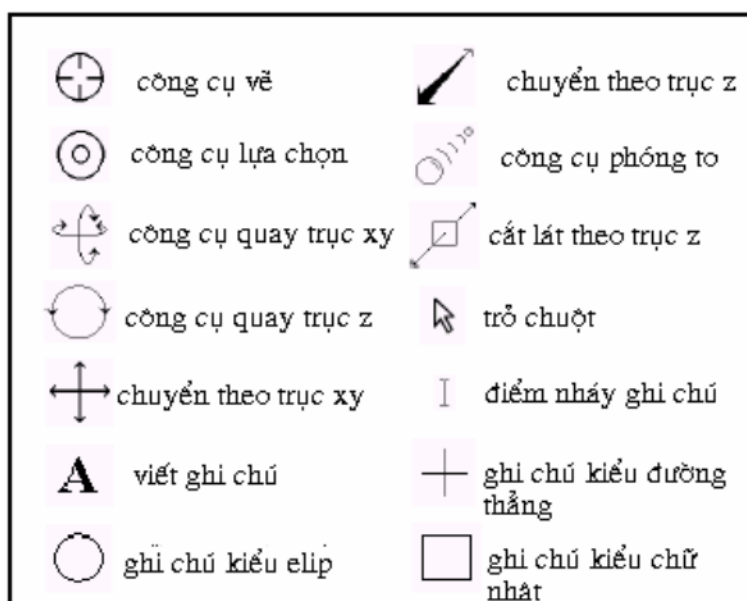
Thay vì phải dùng chuột ta có thể dùng bàn phím để di chuyển đến những lựa chọn cần thiết. Ví dụ để mở select menu ta nhấn đồng thời hai phím [Alt] + [S] ([Alt] và [S]). Để chọn các lựa chọn khác trong hộp thoại ta nhấp tiếp vào ký tự tắt được gạch dưới trong mỗi lựa chọn. Ví dụ để chọn tiếp select all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

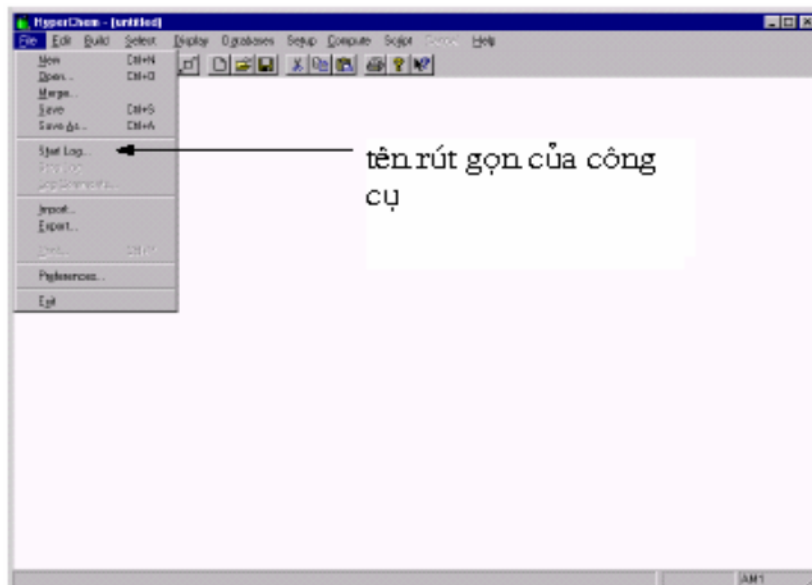
Các công cụ quan trọng trên thanh công cụ



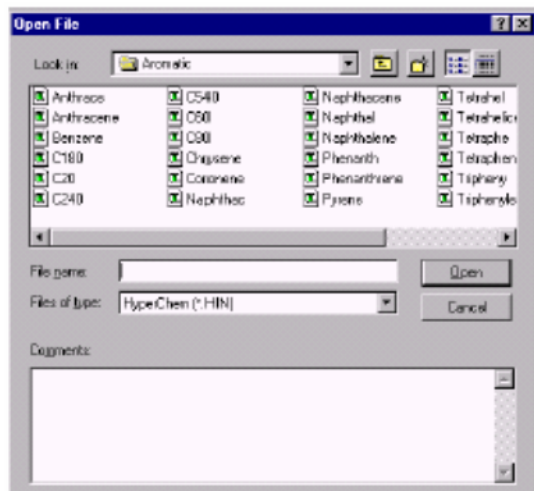
Các thao tác trên HyperChem

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:

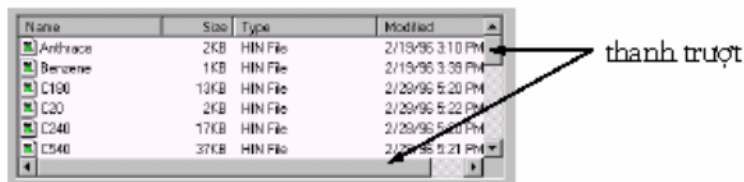


3. Nhấp trái chuột vào Open. Màn hình sẽ hiện ra như sau:



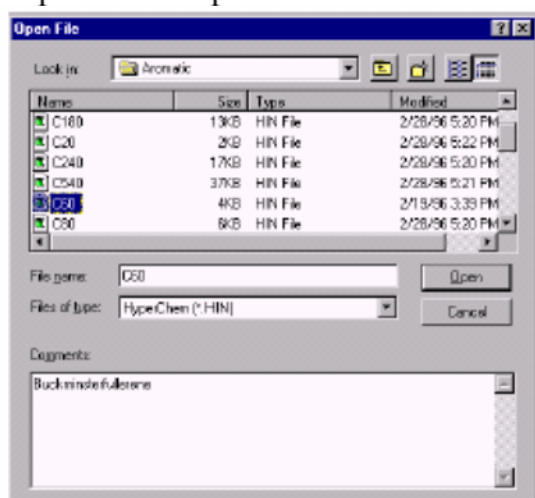
Hướng dẫn sử dụng HyperChem 7.04

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



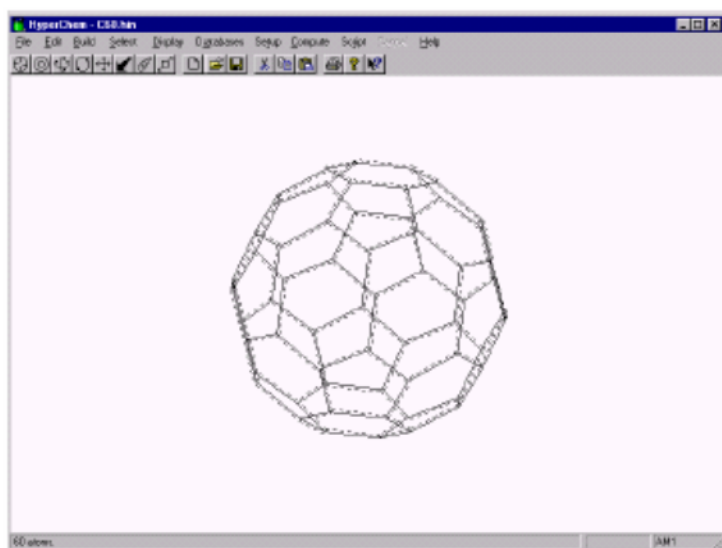
Để kéo thanh trượt ta nhấp trái biểu tượng chuột vào thanh trượt, giữ nguyên như thế và rê chuột theo chiều muốn kéo.

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



Trên màn hình sẽ hiện ra phân tử chứa trong file

Hướng dẫn sử dụng HyperChem 7.04

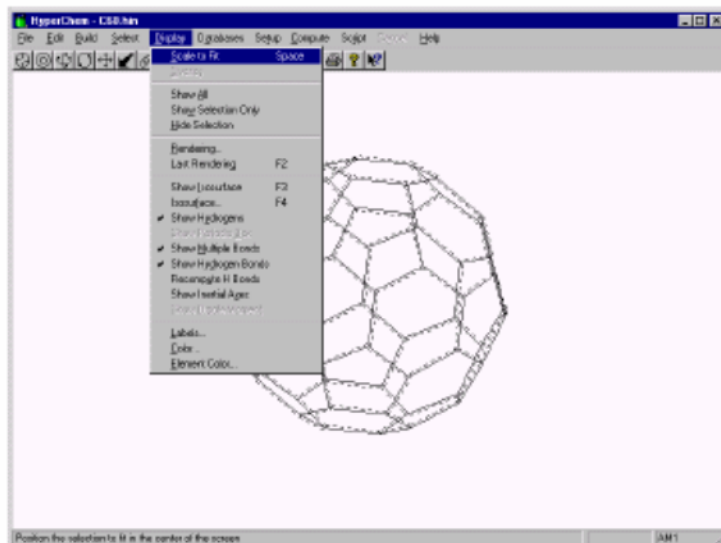


Cách sử dụng Display Settings

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

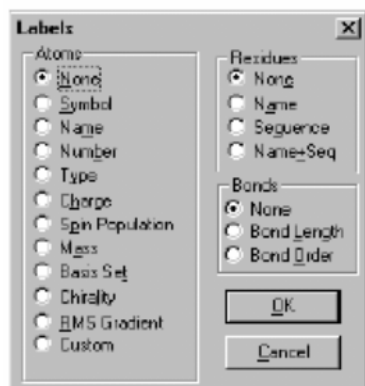
Để mở Display menu ta thực hiện như sau

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.



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.
- Type** 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** Giá trị vô hướng của vectơ biến thiên mô tả trường lực trên một nguyên tử.
- Custom** Đặt tùy 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-terminus).1,2,3
- Name+Seq** Cả tên lẫn thứ tự.

Bonds

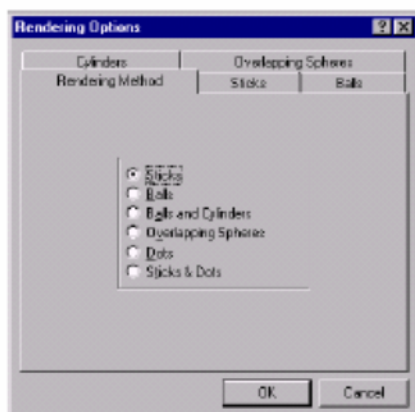
None	Bỏ tất cả các nhãn
Bond Length	Độ dài liên kết giữa các nguyên tử
Bond Order	Thứ tự liên kết tính toán theo cơ học lượng tử.

Hình thức biểu diễn phân tử:

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

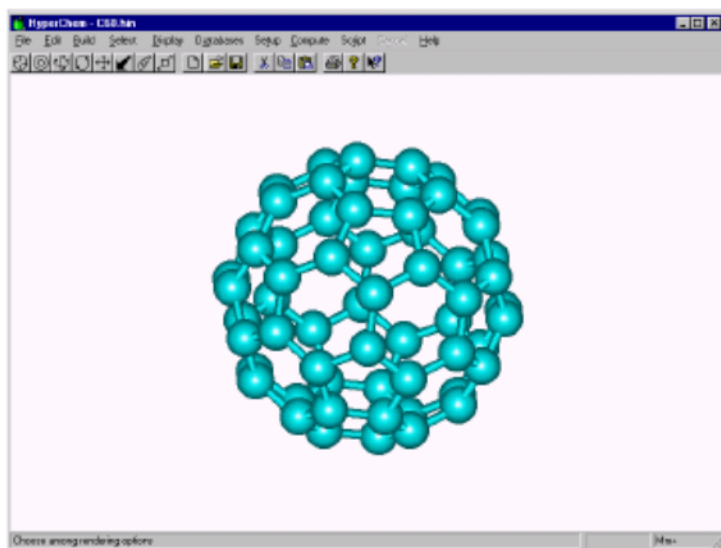
Thay đổi hình thức biểu diễn:

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 màn 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 màu 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:

