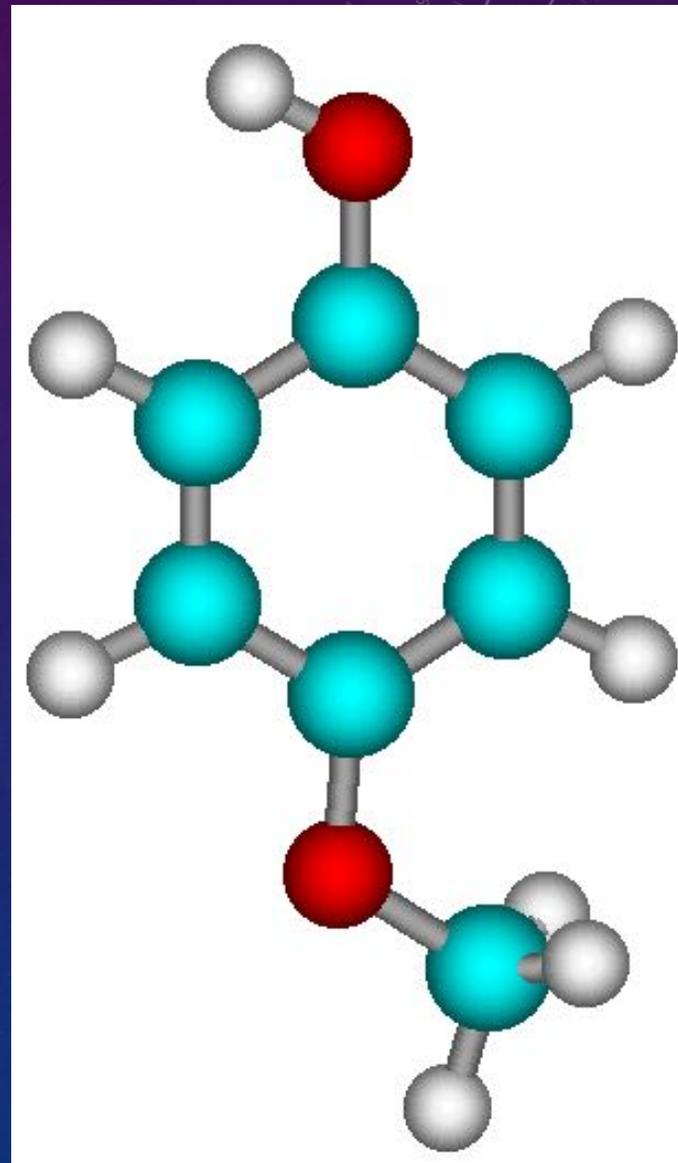
The background features a dark blue gradient with faint, light blue circular patterns and a scale on the left side. The scale has numerical markings from 140 to 260 in increments of 10. The circular patterns consist of concentric circles, some with arrows indicating direction, and some with dashed lines. The overall aesthetic is technical and scientific.

# ПРОГРАММА HYPERCHEM

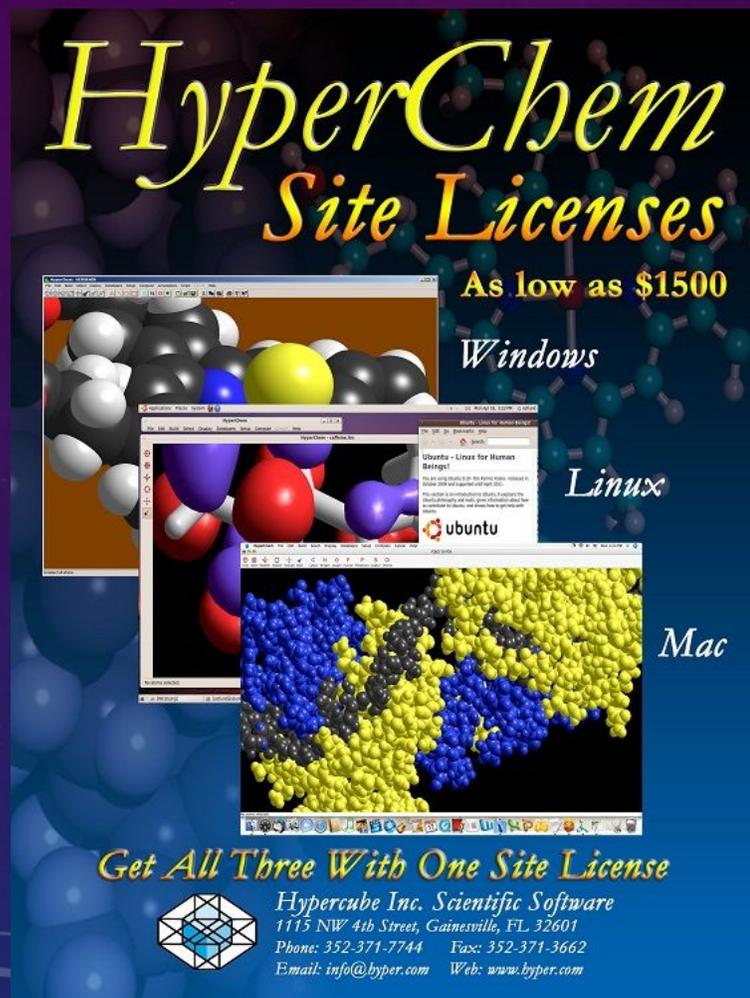
ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ  
МОЛЕКУЛ

# ПРОБЛЕМА

Одним из важнейших элементов химического исследования является анализ геометрической структуры соединений. Эта область науки получила название структурная химия. Структурные формулы отражают связанность различных атомов в молекуле друг с другом. Они не всегда позволяют передать взаимосвязи между атомами, в связи с чем возникает необходимость отображения структуры в виде геометрического образа - задача визуализации структуры.



# HYPERCHEM



*HyperChem*  
*Site Licenses*

As low as \$1500

Windows

Linux

Mac

*Get All Three With One Site License*

 Hypercube Inc. Scientific Software  
1115 NW 4th Street, Gainesville, FL, 32601  
Phone: 352-371-7744 Fax: 352-371-3662  
Email: [info@hyper.com](mailto:info@hyper.com) Web: [www.hyper.com](http://www.hyper.com)

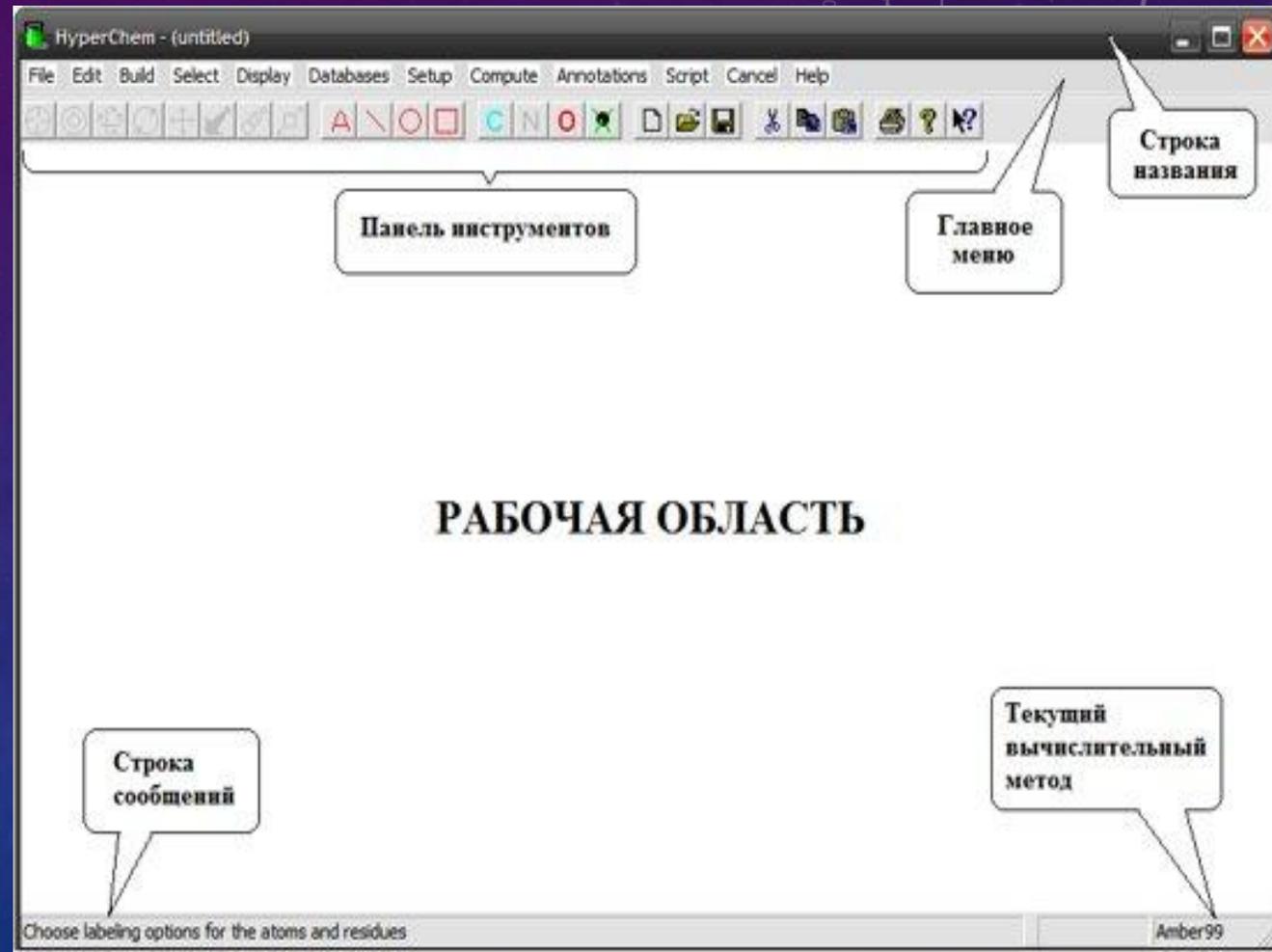
The advertisement features a dark blue background with a molecular structure. It displays three overlapping screenshots of the HyperChem software interface on different operating systems: Windows (top), Linux (middle), and Mac (bottom). The text is in a mix of white and yellow fonts, with the company name in a large, stylized script. The price is highlighted in yellow. The contact information is at the bottom left.

Это одна из наиболее популярных программ, позволяющих решать задачи редактирования структурных формул химических соединений и визуализации.

HyperChem предназначена для проведения расчетов характеристик молекул (электронных, термодинамических, спектральных и т.д.) неэмпирическими и полуэмпирическими методами. Имеется графический редактор, базы данных для построения пептидов, белков, фрагментов ДНК, полимеров и пр.

# ПОЛЬЗОВАТЕЛЬСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ПРОГРАММЫ HYPERCHEM

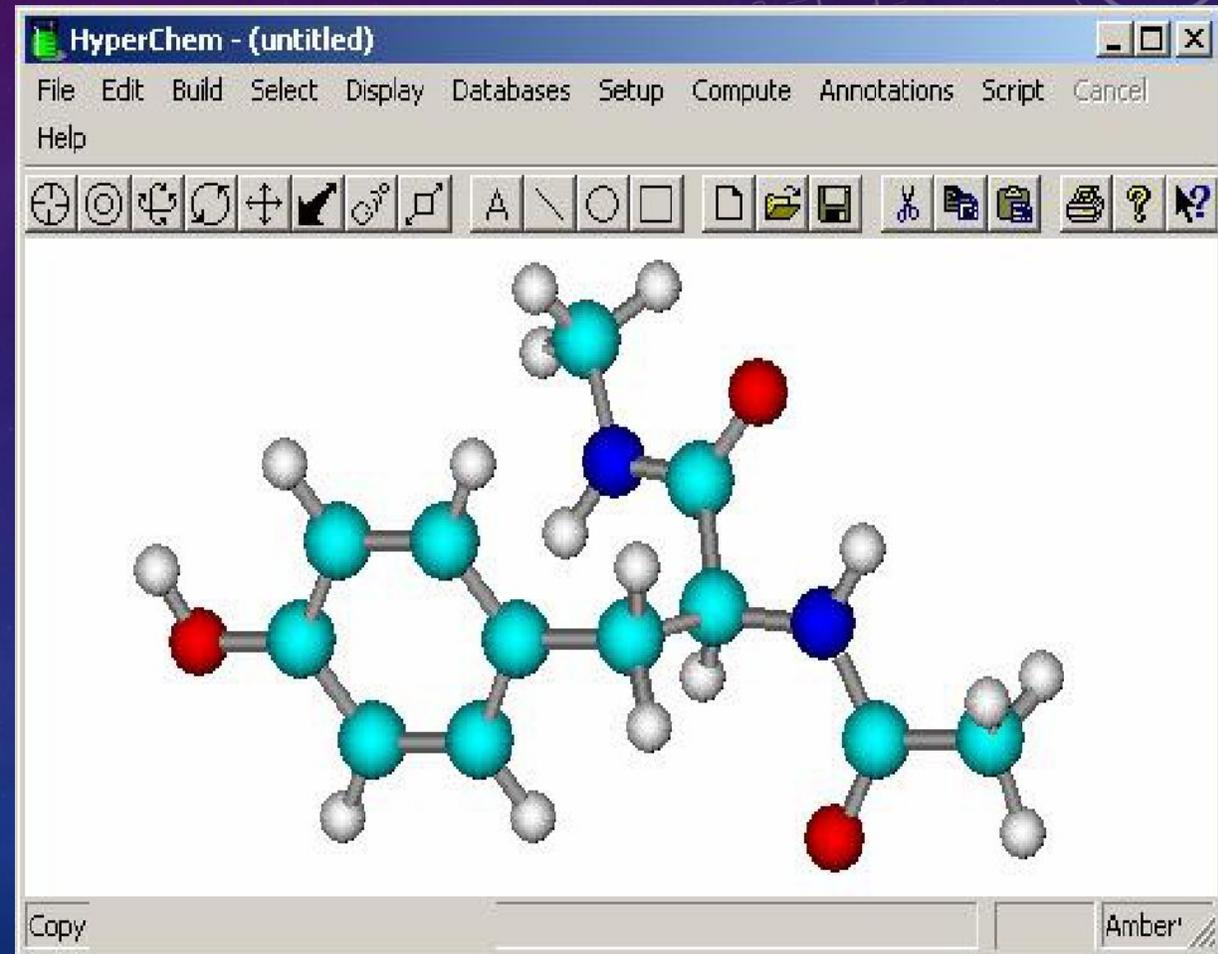
В главном окне программы можно выделить несколько элементов. Вверху находится строка названия файла, с которым вы работаете в настоящий момент, а также кнопки свертывания, развертывания и закрытия программы. Непосредственно под этой строкой расположены главное меню программы и панель инструментов, где собраны инструменты, необходимые для создания и редактирования моделей молекулярных структур. В нижнем левом углу окна находится строка сообщений, в которой отображается текущая информация (длины связей, валентные углы, энергия и т.д.). В нижнем правом – название текущего вычислительного метода.



# ГЛАВНОЕ МЕНЮ ПРОГРАММЫ

**File** (Файл). В пункте представлен набор возможных действий по открытию, сохранению, печати текущих файлов  
подпункт

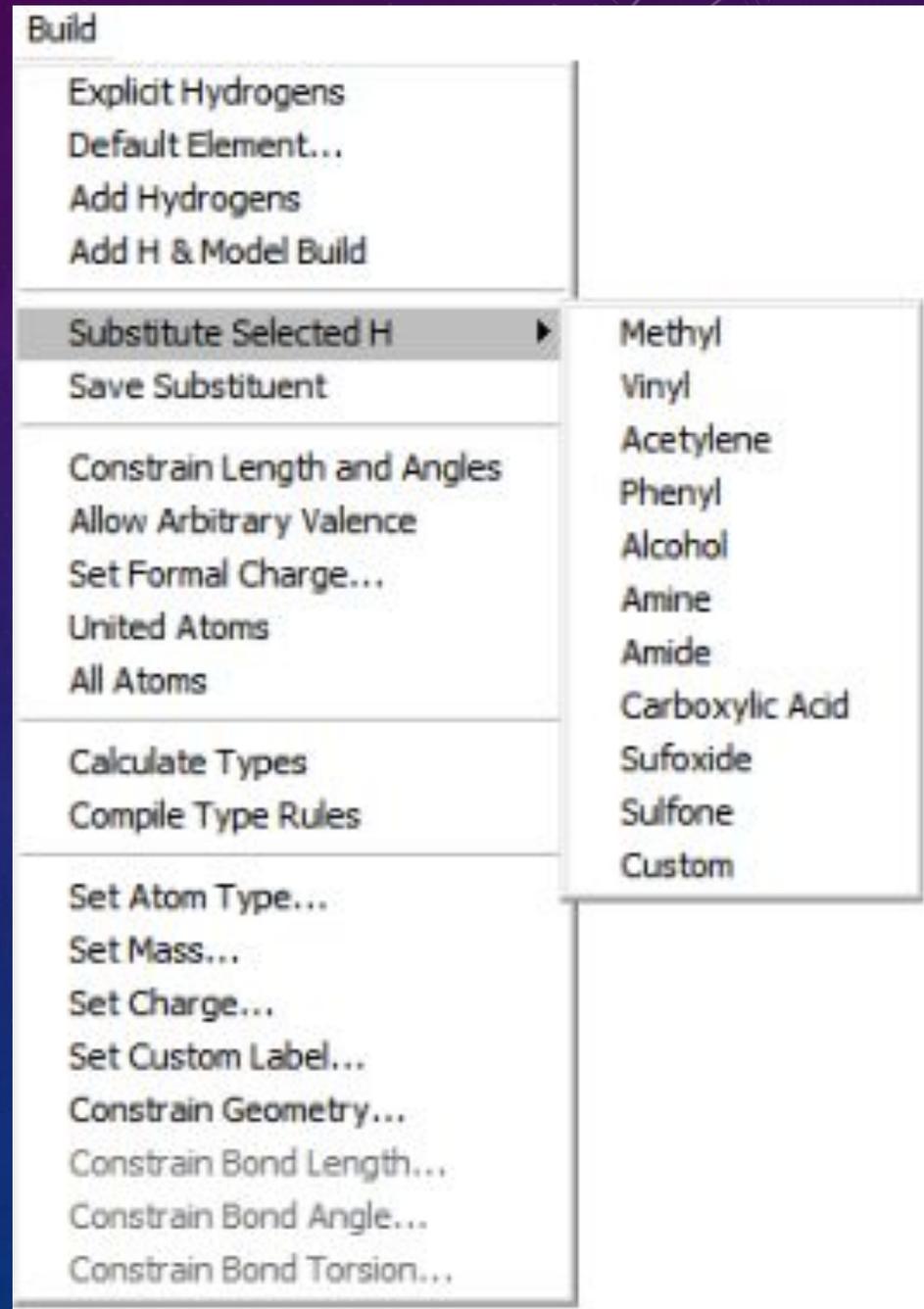
**Edit** (Редактирование). Содержит инструменты для редактирования отображаемых в рабочей области моделей. Имеется возможность отмены произведенных действий, удаления, вставки, вырезания моделей, копирования, вращения модели, установки значений длин связей между атомами, валентных и торсионных углов.



# МЕНЮ BUILD (СТРОИТЬ)

В пункте меню **Build** собраны инструменты, необходимые для построения в рабочей области моделей молекул.

Среди наиболее важных: *Explicit Hydrogens* – при добавлении к любому элементу новой связи на свободном ее конце программа будет по умолчанию ставить атом водорода.



*Default Element...* вызывает таблицу элементов, в которой задается тип необходимого в текущий момент химического элемента.

The image shows two windows from a software application. The top window is titled "Element Table" and displays a periodic table of elements. The element "Carbon" is selected, and its symbol "C" is shown in a text box. Below the table are checkboxes for "Allow Arbitrary Valence" and "Explicit Hydrogens", and a "Properties..." button. The bottom window is titled "Element Properties" and shows the properties for Carbon (atomic number 6, symbol C). The properties are listed in two columns:

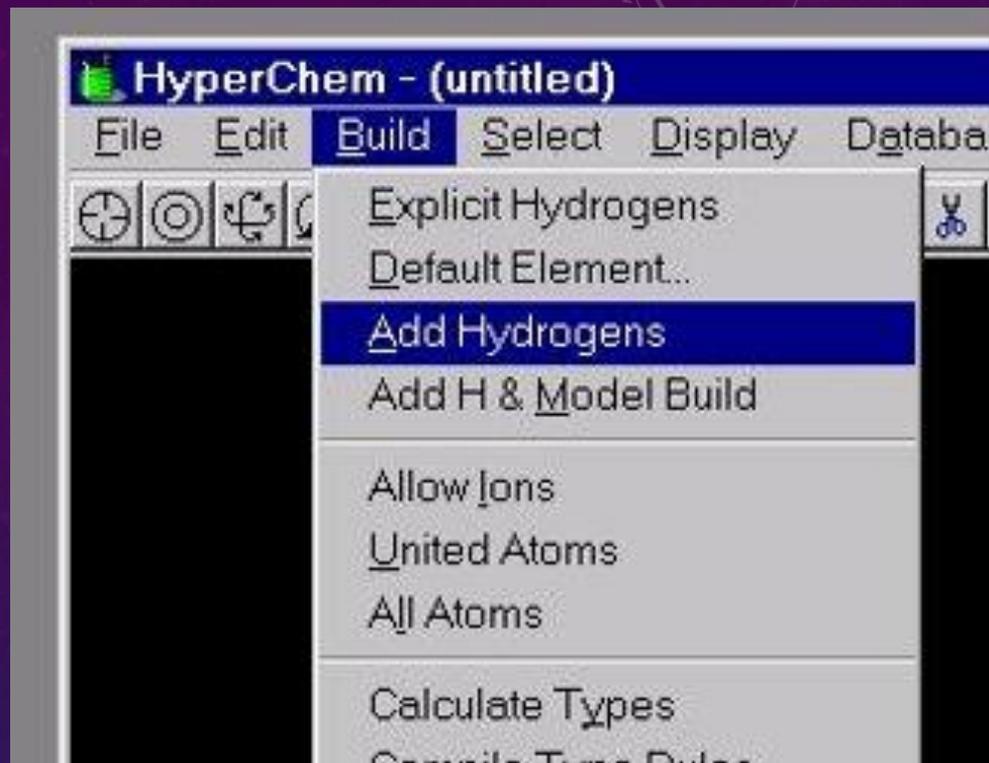
|                         |             |                           |                        |
|-------------------------|-------------|---------------------------|------------------------|
| Atomic Weight:          | 12.011      | Electronegativity:        | 2.55                   |
| Electron Configuration: | 1s2 2s2 2p2 | 1st Ionization Potential: | 11.260 V               |
| Atomic Radius:          | 0.70 Å      | 2nd Ionization Potential: | 24.383 V               |
| Melting Point (1 atm):  | n/a         | 3rd Ionization Potential: | 47.888 V               |
| Boiling Point (1 atm):  | 3825.00 °C  | Density (298K):           | 2.27 g/cm <sup>3</sup> |
| Heat of Fusion:         | n/a         | Specific Heat (STP):      | 0.71 J/gK              |
| Heat of Vaporization:   | n/a         |                           |                        |

An "OK" button is located at the bottom of the "Element Properties" window.

The image shows a "Build" menu with several options. The "Substitute Selected H" option is highlighted, and a submenu is open to its right, listing various substituents:

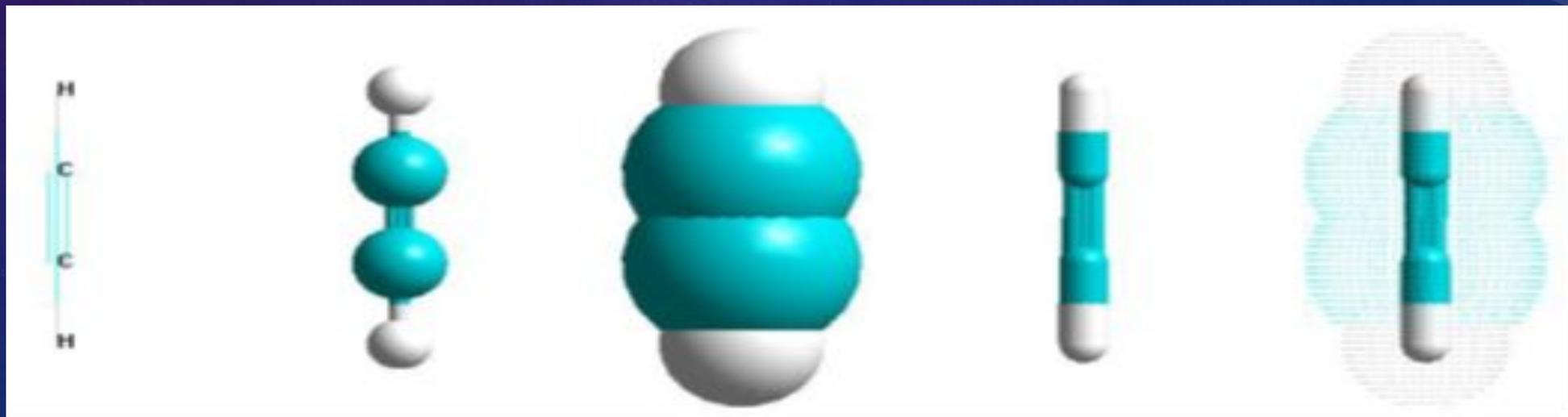
- Explicit Hydrogens
- Default Element...
- Add Hydrogens
- Add H & Model Build
- Substitute Selected H (highlighted)
- Save Substituent
- Constrain Length and Angles
- Allow Arbitrary Valence
- Set Formal Charge...
- United Atoms
- All Atoms
- Calculate Types
- Compile Type Rules
- Set Atom Type...

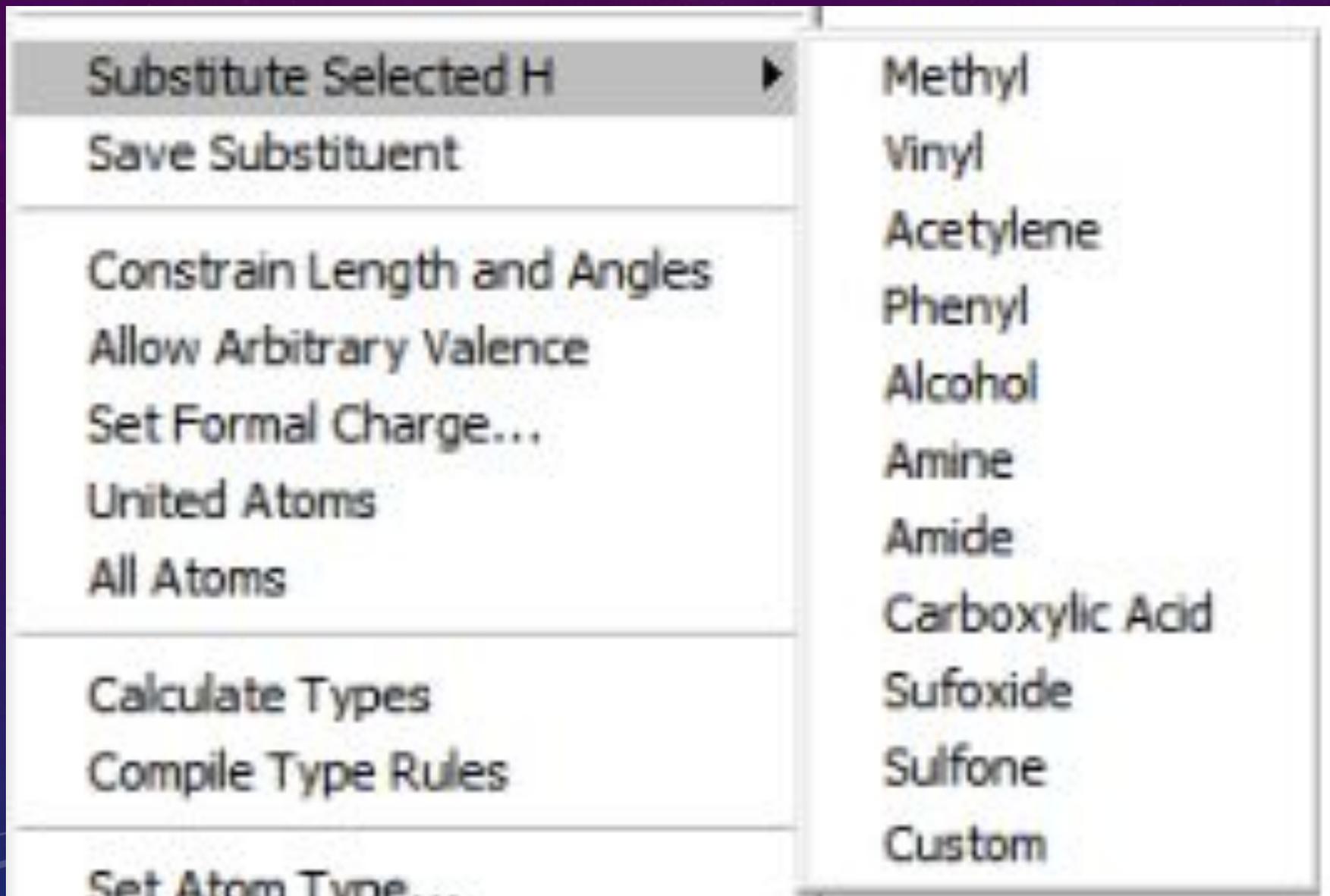
The submenu options are: Methyl, Vinyl, Acetylene, Phenyl, Alcohol, Amine, Amide, Carboxylic Acid, Sulfoxide, Sulfone, and Custom.



## ***ADD HYDROGENS AND ADD H & MODEL BUILD***

Выбор этих подпунктов - все свободные связи программа добавляет атомы водорода и приводится к 3D виду.

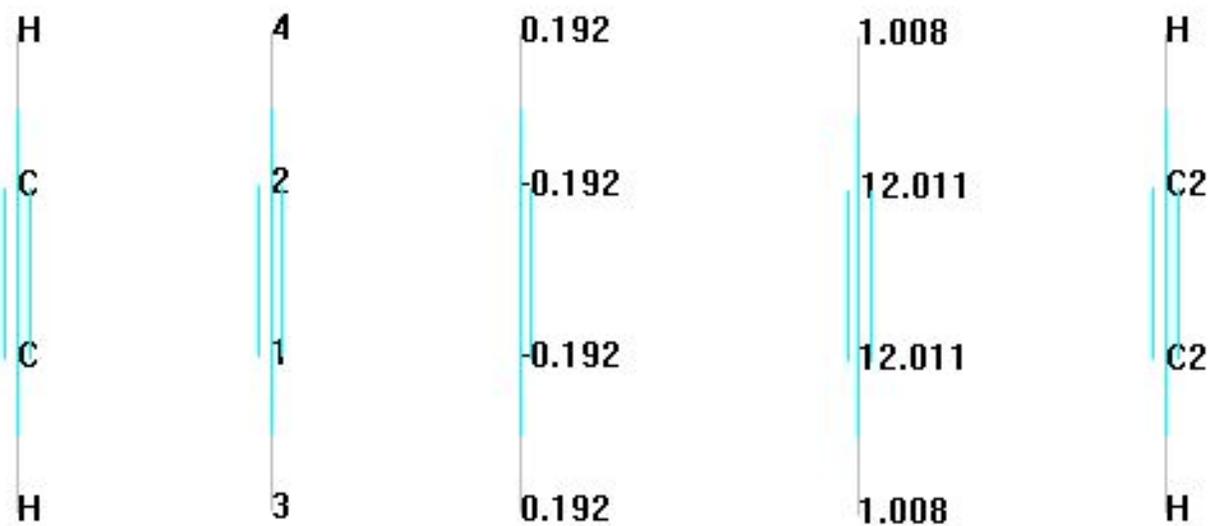




Подпункт *Substitute Selected H* заменяет выделенный атом водорода определенной группировкой, например, метильной, фенильной, ацетиленовой и прочее.

Сохранить заместитель позволяет подпункт *Save Substituent*.

- Подпункты Set... позволяют установить, в частности, пользовательские значения типа, массы, заряда.
- Подпункты Constrain... – задать значения длин связей, валентных и торсионных углов.



Build

- Explicit Hydrogens
- Default Element...
- Add Hydrogens
- Add H & Model Build
- Substitute Selected H**
  - Methyl
  - Vinyl
  - Acetylene
  - Phenyl
  - Alcohol
  - Amine
  - Amide
  - Carboxylic Acid
  - Sufoxide
  - Sulfone
  - Custom
- Save Substituent
- Constrain Length and Angles
- Allow Arbitrary Valence
- Set Formal Charge...
- United Atoms
- All Atoms
- Calculate Types
- Compile Type Rules
- Set Atom Type...
- Set Mass...
- Set Charge...
- Set Custom Label...
- Constrain Geometry...
- Constrain Bond Length...
- Constrain Bond Angle...
- Constrain Bond Torsion...

# ПАНЕЛЬ УПРАВЛЕНИЯ HYPERCHEM

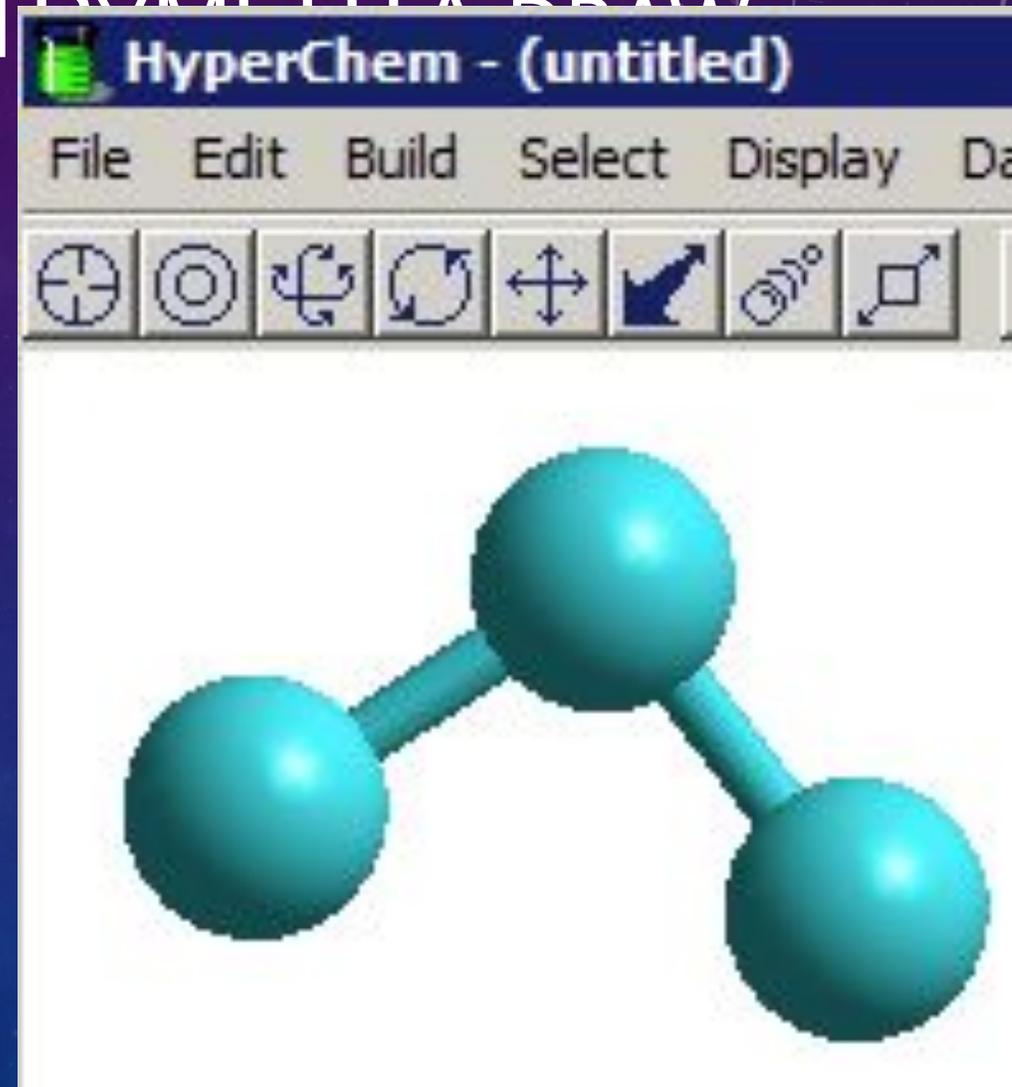
- Draw Создание атомов и молекул
- Select Удаление не нужных вариантов
- Rotate out-of-plane Внеплоскостное вращение
- Rotate in-plane Вращение в одной плоскости
- Translate Перемещать
- Z-Translate Перемещение по оси Z
- Zoom Изменение масштаба

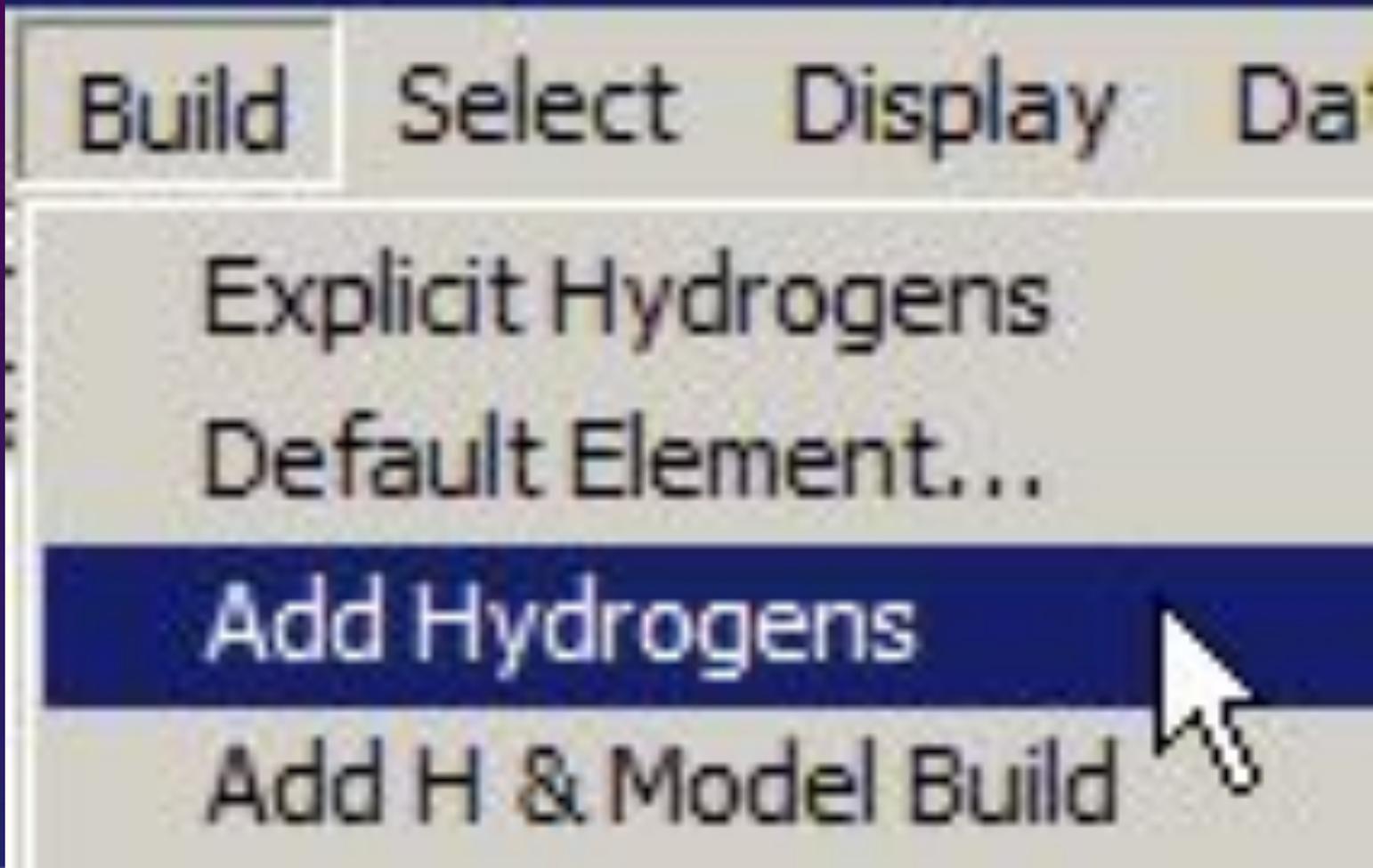


# ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНСТРУМЕНТА DRAW

Создадим простую молекулу пропана.  
Это можно сделать,  
выбрав элемент углерода в качестве  
интересующего элемента, а затем  
используя инструмент «Рисование», чтобы  
набросать каркас.

Длины связей будут установлены на  
правильные значения на более позднем  
этапе. В конце процесса экран должен  
выглядеть следующим образом:





СЛЕДУЮЩИМ  
ШАГОМ  
ЯВЛЯЕТСЯ  
«ДОБАВИТЬ  
ВОДОРОД» В  
РАЗДЕЛЕ «BUILD»

# ШАГ «ОПТИМИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИИ» (В РАЗДЕЛЕ «ВЫЧИСЛИТЬ»).

ТУТ УСТАНОВЛИВАЮТСЯ ДЛИННЫ  
СВЯЗЕЙ ПОСРЕДСТВОМ МИНИМИЗАЦИИ  
ЭНЕРГИИ СТРУКТУРЫ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫБРАННОГО  
СИЛОВОГО ПОЛЯ

**Molecular Mechanics Optimization**

Algorithm

- Steepest Descent
- Fletcher-Reeves (Conjugate gradient)
- Polak-Ribiere (Conjugate gradient)
- Eigenvector following
- Block-diagonal Newton-Raphson
- Conjugate Directions

Options

Termination Condition

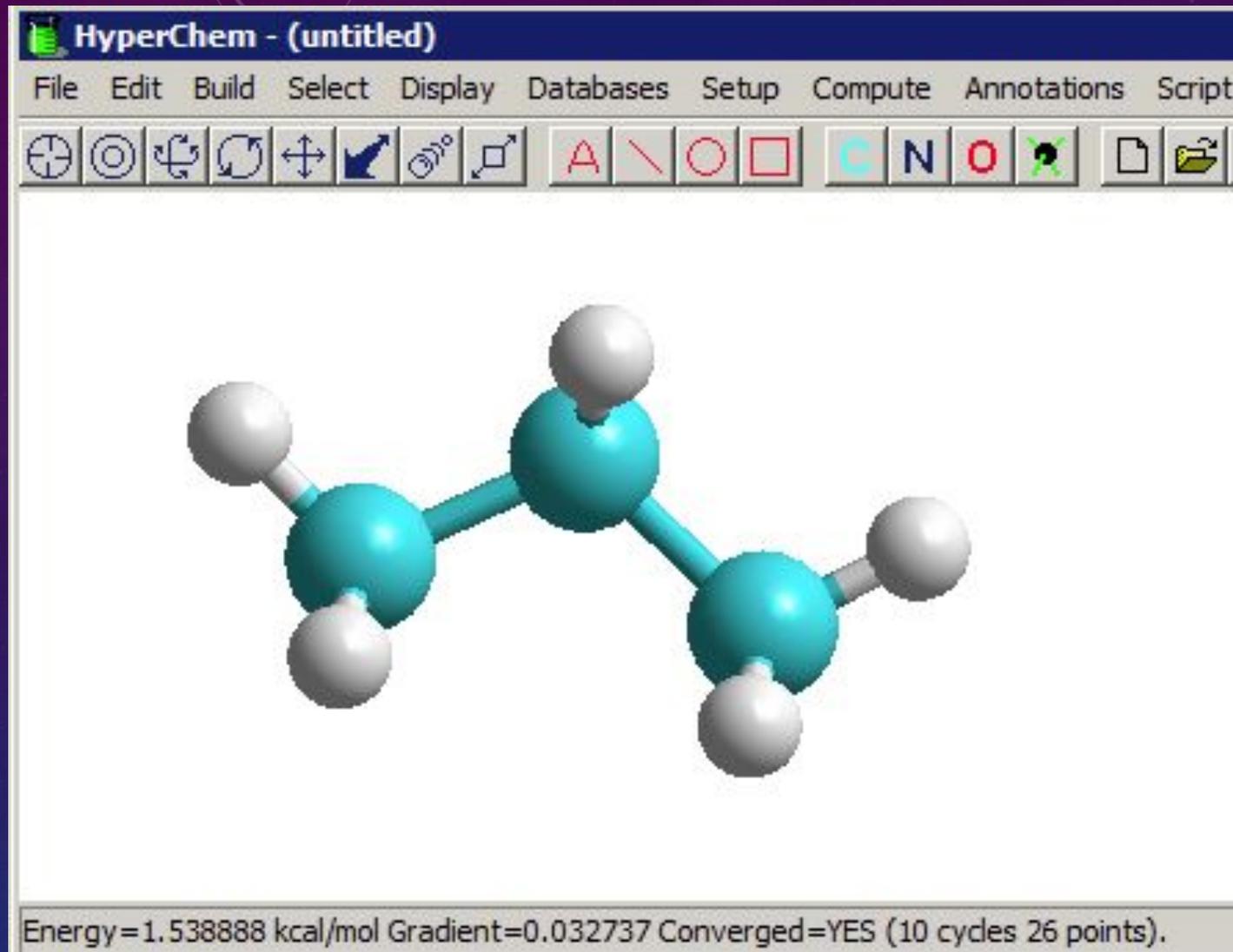
RMS gradient of:  kcal/(Å mol)

or:  maximum cycles

In vacuo

Periodic boundary condition

Screen refresh period:  cycles

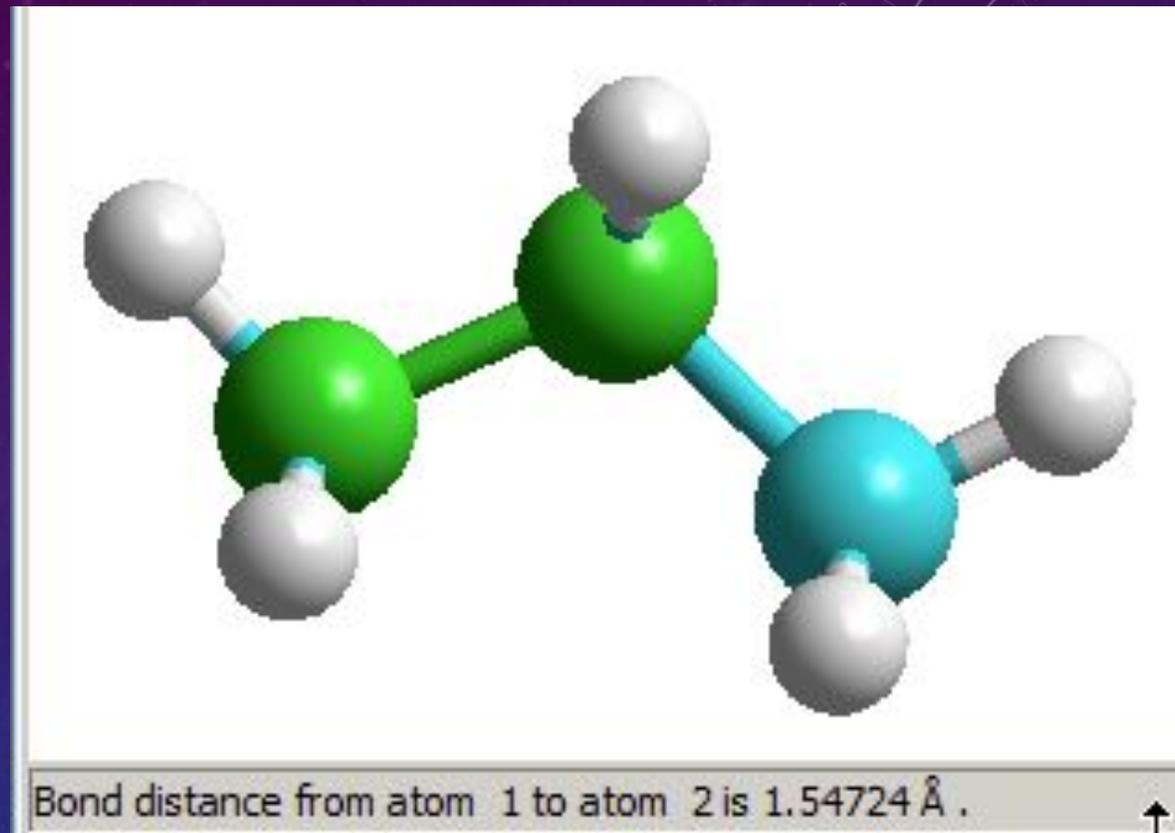


ОКОНЧАТЕЛЬНАЯ СТРУКТУРА С МИНИМИЗАЦИЕЙ  
ЭНЕРГИИ

Можно «выбрать» конкретные атомы с помощью кнопки.



Например, выбор первых двух атомов углерода дает расстояние связи



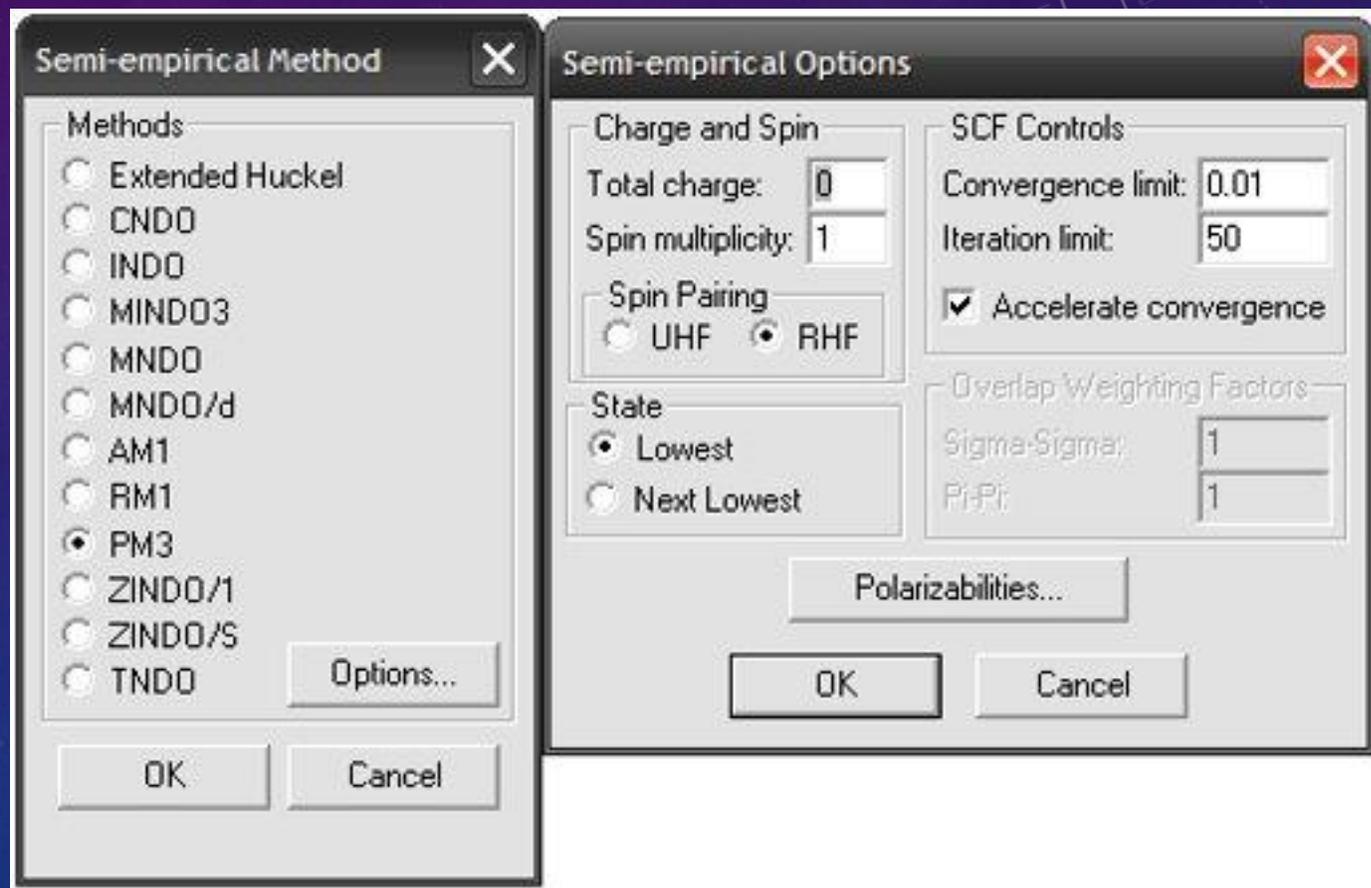


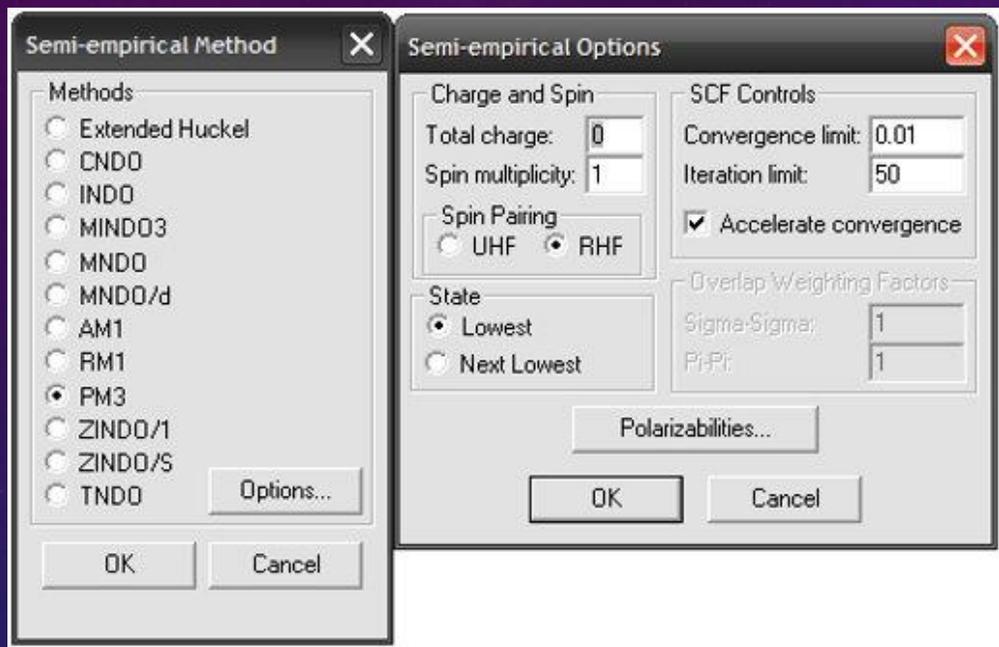
МОЖНО ПОЛУЧИТЬ  
ГРАФИК  
ЭНЕРГОПОТРЕБЛЕНИЯ  
ДЛЯ ИЗМЕНЕНИЯ ЭТОГО  
РАССТОЯНИЯ, ВЫБРАВ  
«ВЫЧИСЛИТЬ»  
«ПОТЕНЦИАЛ», В  
РЕЗУЛЬТАТЕ ЧЕГО  
ПОЯВИТСЯ ЭКРАН,  
ОПРЕДЕЛЯЮЩИЙ  
ПРЕДЕЛЫ

# РАСЧЕТЫ В ПРОГРАММЕ HYPERCHEM ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Полуэмпирические методы расчета можно использовать для всех типов расчетов в пункте главного меню **Compute**. Полуэмпирические методы решают уравнение Шредингера для атомов и молекул с использованием определенных приближений и упрощений.

В ПРОГРАММЕ HYPERCHEM  
ПРЕДСТАВЛЕНО 12  
ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

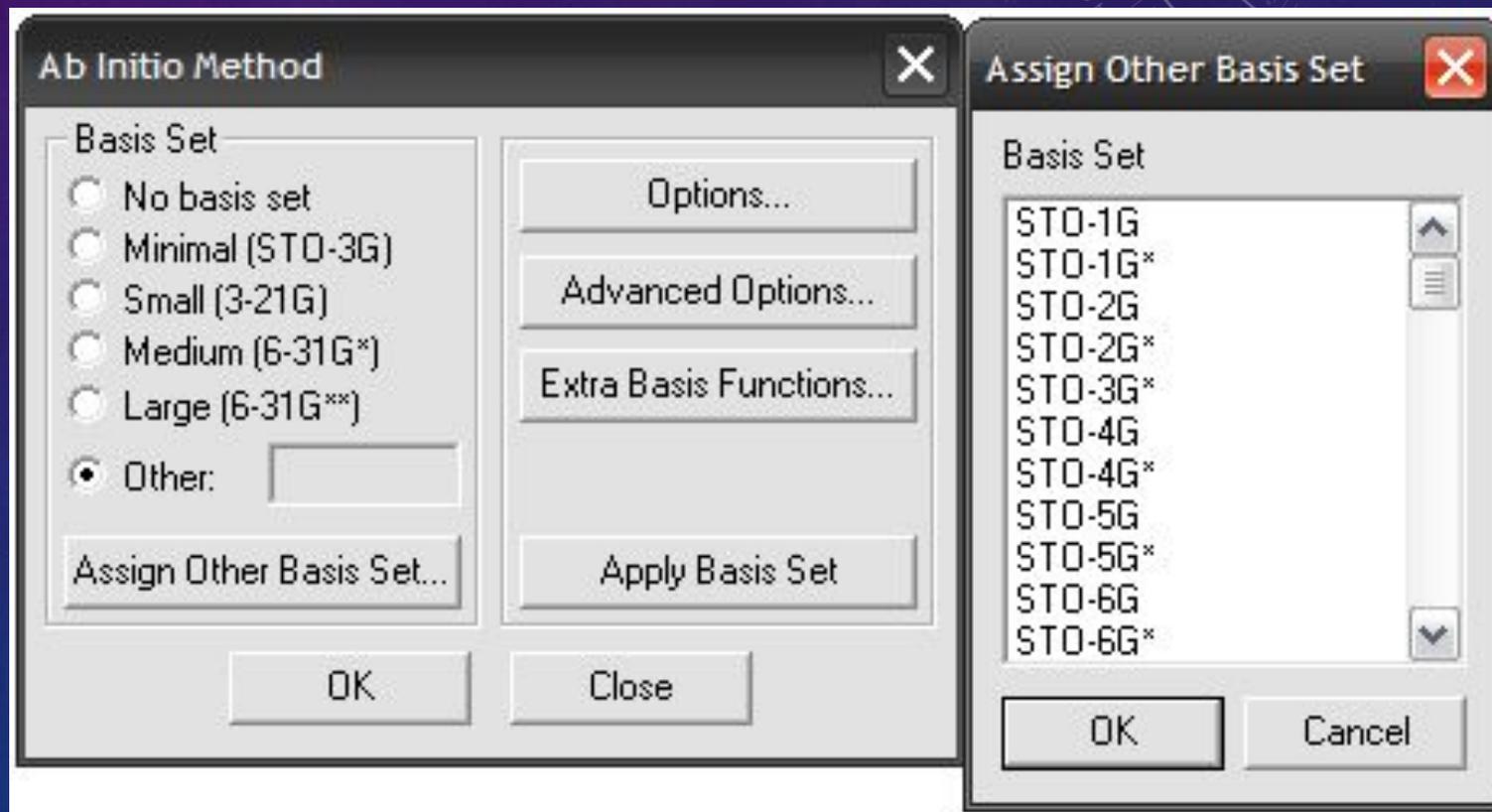




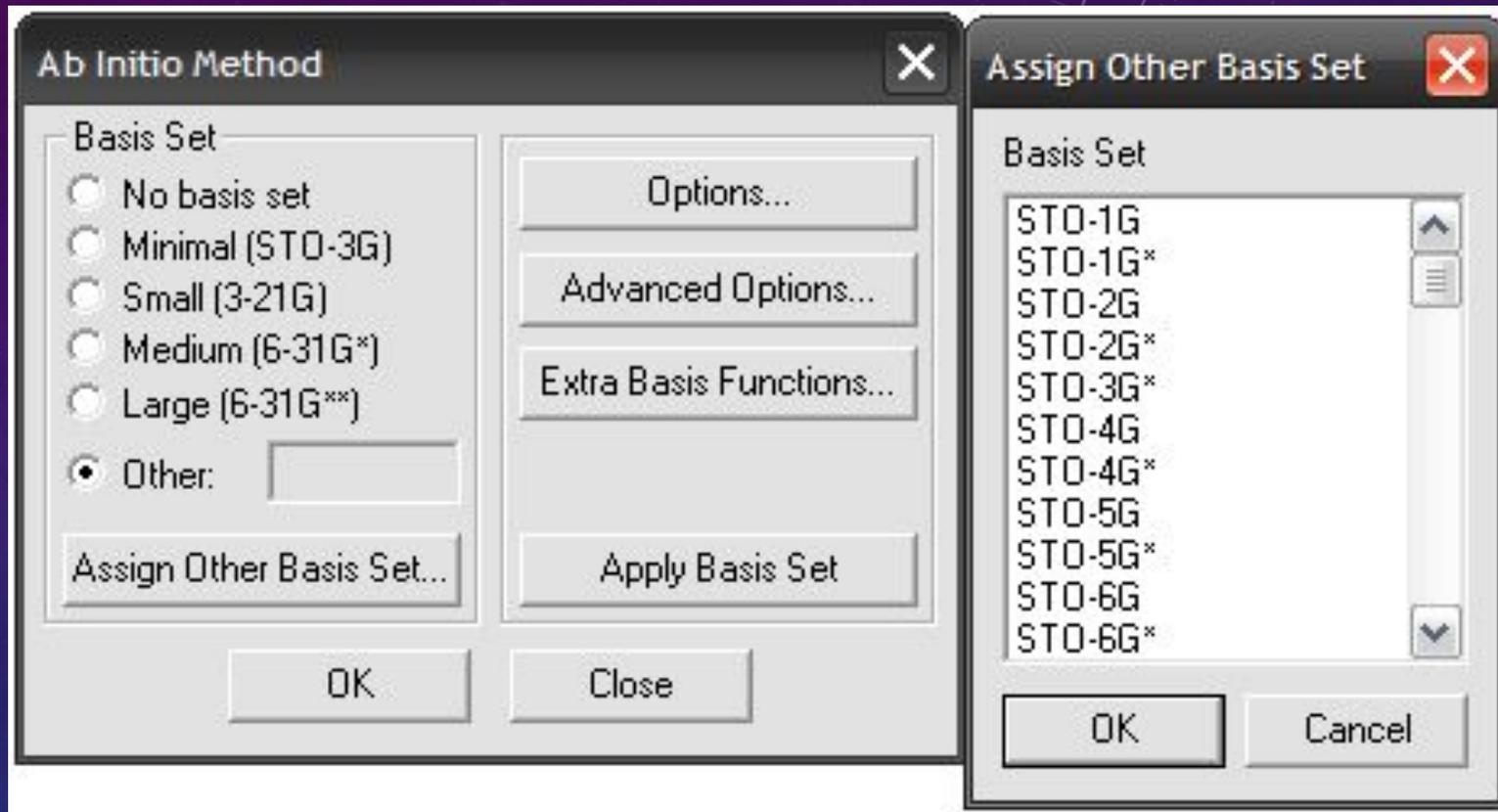
Все методы этой группы характеризуются тем, что расчет ведется только для валентных электронов, пренебрегаются интегралы определенных взаимодействий, используются стандартные не оптимизированные базисные функции электронных орбиталей и используются некоторые параметры, полученные в эксперименте. Экспериментальные параметры устраняют необходимость расчетов ряда величин и корректируют ошибочные результаты приближений. Полуэмпирические методы в программе HyperChem могут обрабатывать не все элементы таблицы Менделеева, а только те, параметры которых внесены в файлы параметров.

# AB INITIO (НЕЭМПИРИЧЕСКИЙ МЕТОД ХАРТРИ – ФОКА)

Ab initio метод требует для своих расчетов гораздо больше вычислительных ресурсов, нежели молекулярно-механические и полуэмпирические методы. Особенно это касается оптимизации геометрии или проведения молекулярно-динамических расчетов.



Для оптимизации геометрии рекомендуется на начальном этапе использовать молекулярную механику, затем – один из полуэмпирических методов, для того, чтобы получить более или менее обоснованную начальную геометрию. Однако для ряда неорганических систем молекулярно-механические и полуэмпирические расчеты дают некорректные результаты, поэтому рекомендуется использовать параметр Model Builder, для того чтобы получить более или менее подходящую стартовую геометрию.



Диалоговое окно метода Ab Initio

**HyperChem** - чрезвычайно простая в использовании программа молекулярного моделирования, предназначенная для проведения расчетов характеристик молекул неэмпирическими и полуэмпирическими методами.

Это популярное и хорошо известное решение для молекулярного моделирования как для исследователей, так и для преподавателей и студентов. Он ценится за быстрый доступ, который он предоставляет к широкому спектру методов вычисления и визуализации.