

利用電腦研究化學實驗

高中組化學科第二名

省立桃園高中

作者：陳振男

指導教師：徐玉賢

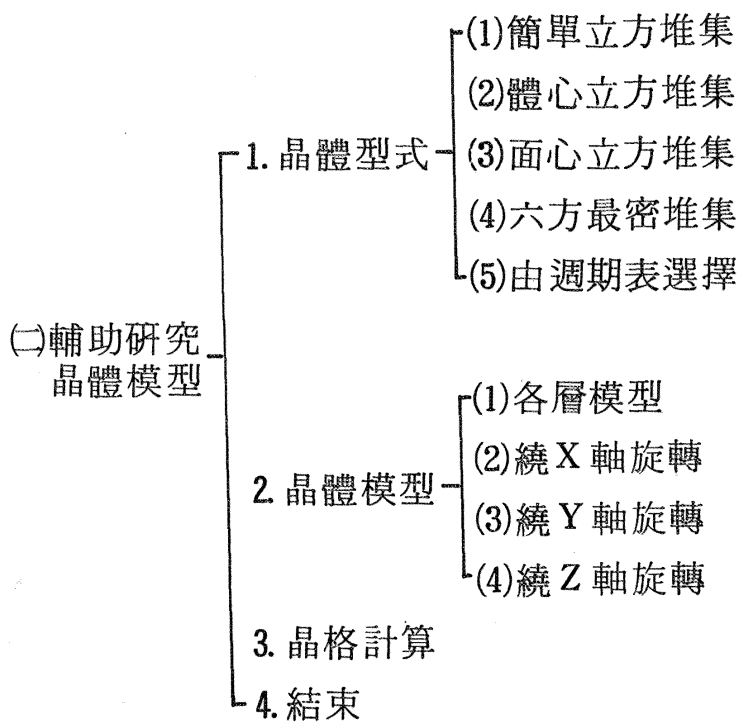
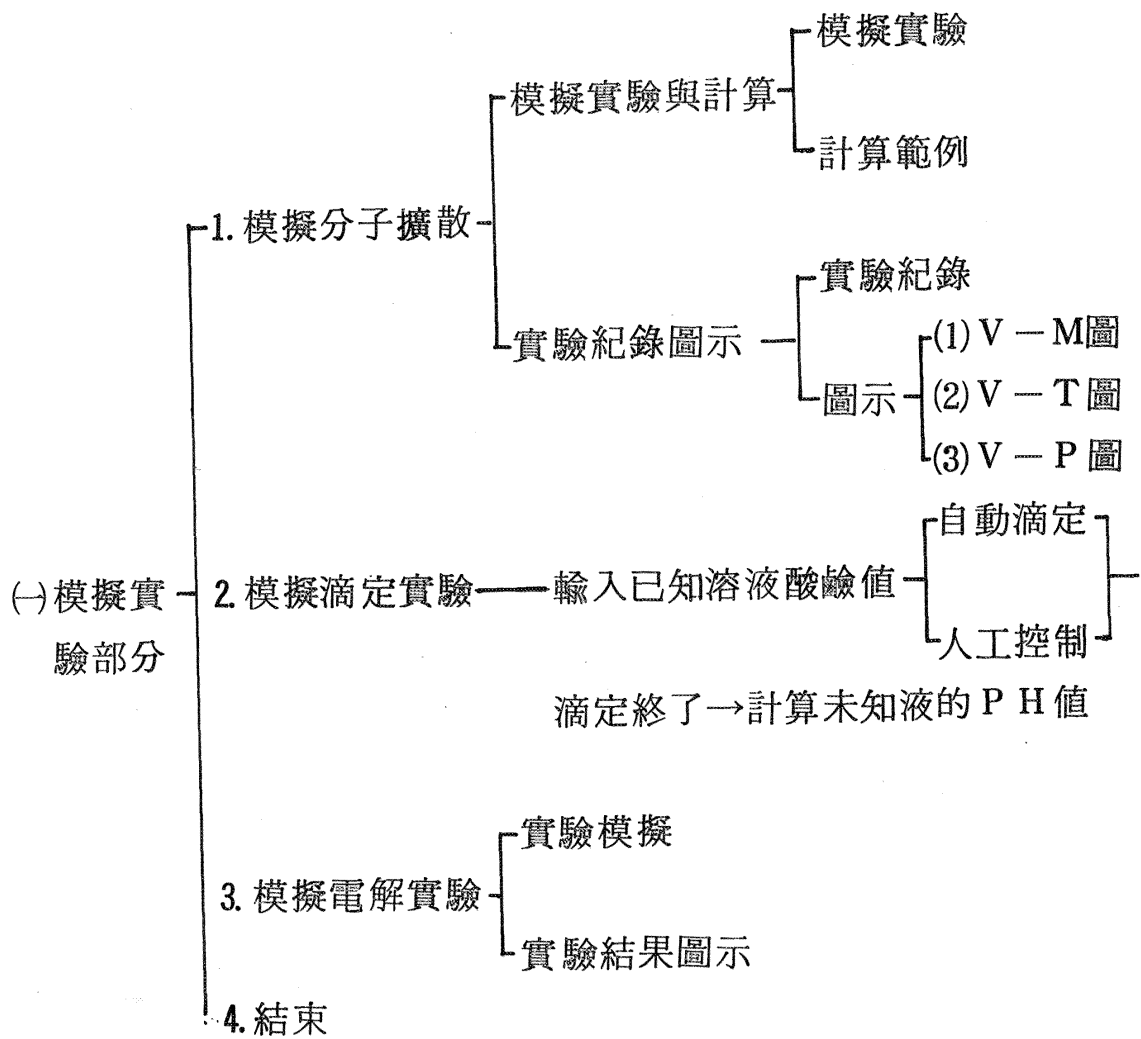
一、研究動機與目的

- (一)電腦的特色之一是很強的計算能力，運用於處理化學計量問題可節省不少人工計算時間。
- (二)真正的擴散實驗常因氣體本身不易察覺，使實驗結果不令人滿意，若運用電腦的繪圖功能來模擬氣體分子擴散實驗，更容易觀察氣體分子擴散的過程及結果，以增加學習的效果。
- (三)由電腦的繪圖功能來模擬滴定及電解，爲了使畫面生動，活潑並可以減少實際實驗的操作時間，可提供作爲預備實驗或沒有時間做實驗的同學作參考。
- (四)金屬晶體堆集晶形多是立體結構，故大多數學習者在學習此一部份時，常因空間觀念不清或想像力不豐富而倍感困擾，尤其計算單位晶格時，更是頭痛！有鑑於此，吾人利用電腦動畫，將各種堆集晶形加以旋轉，使平面上的圖形，躍然動於螢光幕上，尤其切割晶格及計算過程，更使人一目了然。相信學習者看過之後，必能消除困擾而有所領悟。

二、研究設備

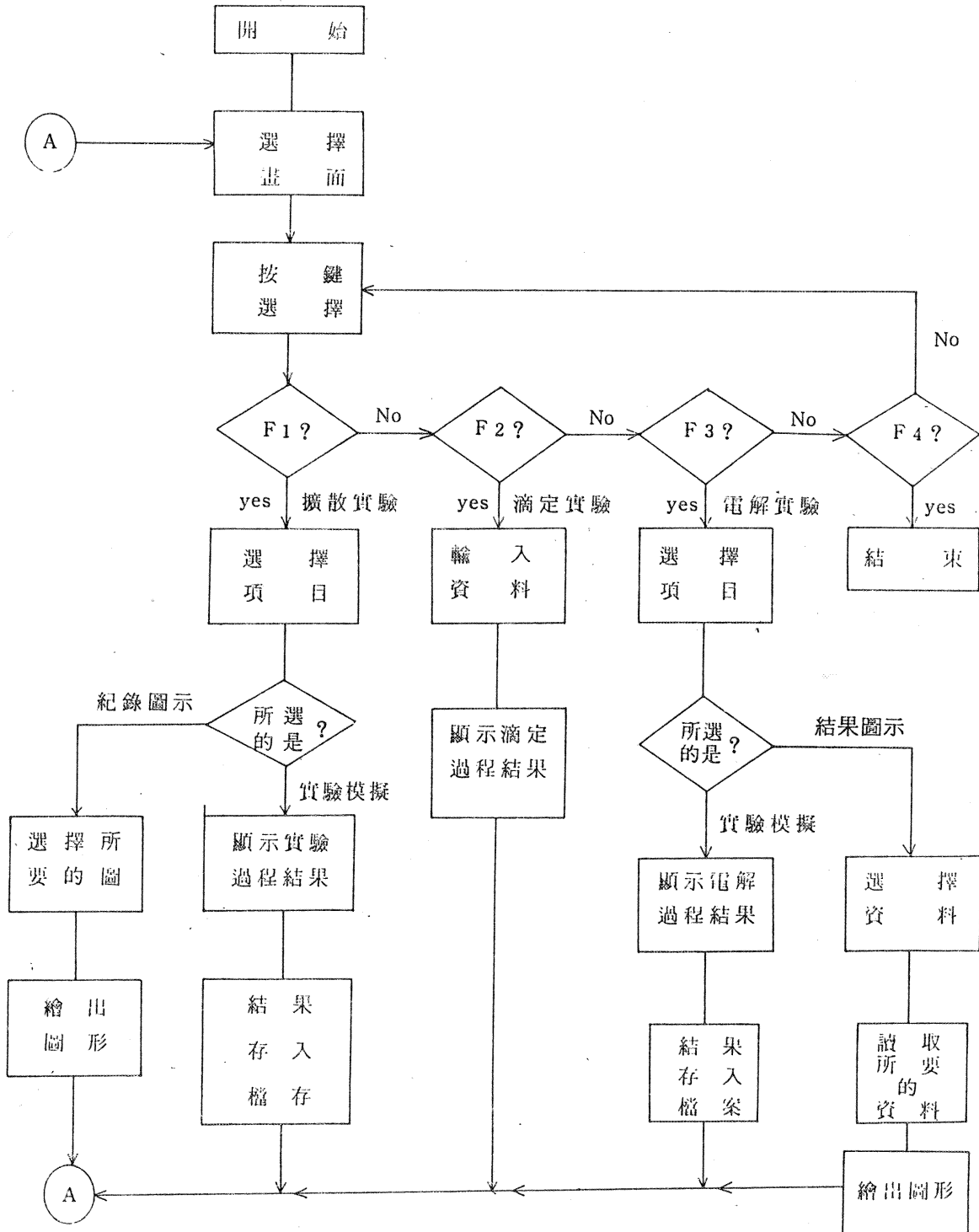
- (一)精業 2002 電腦 (640K)，精業中文 DOS
- (二)Acer 710，True BASIC

三、研究過程

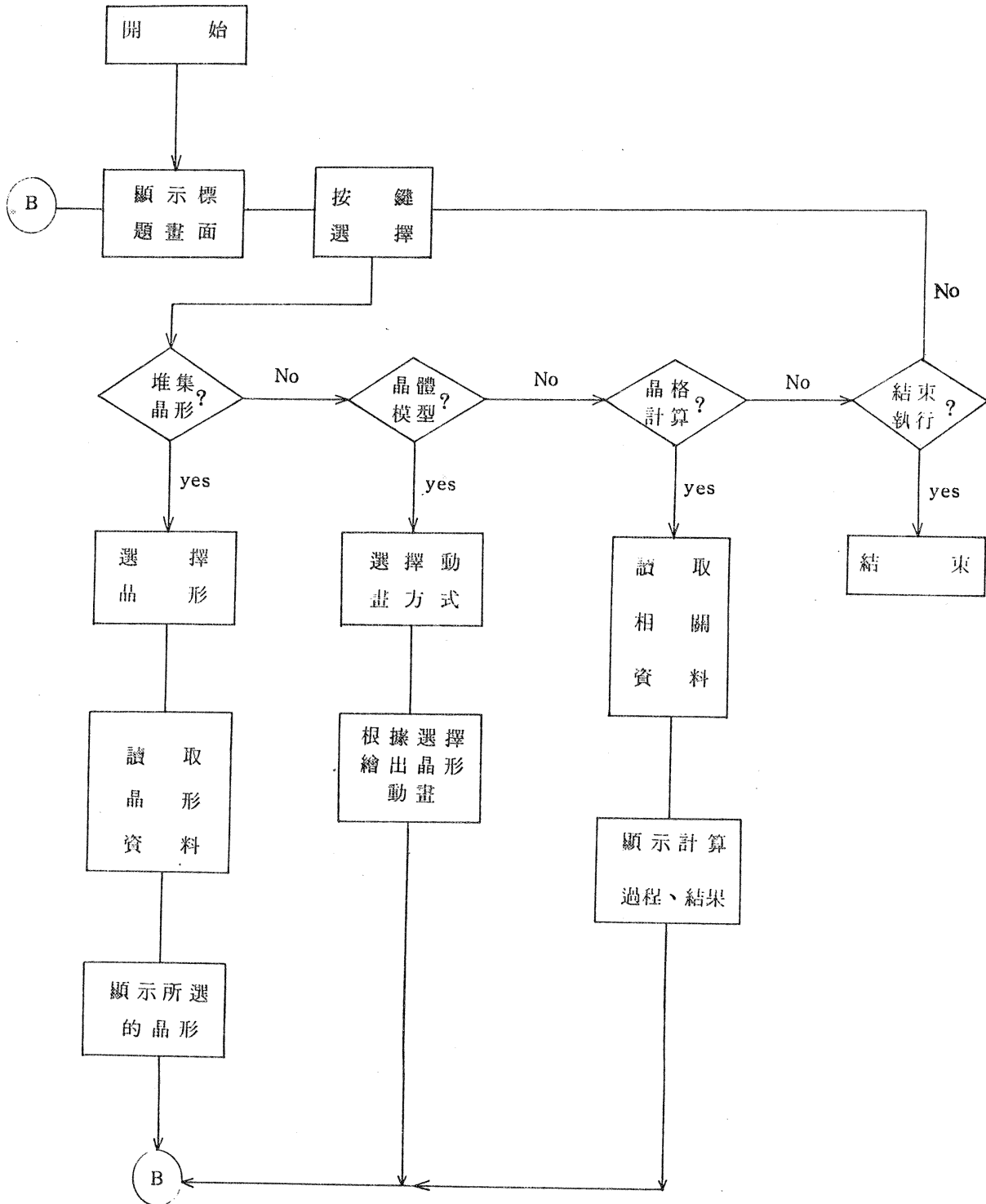


(三) 流程圖：

1. 實驗模擬部份：



2. 金屬晶形部份：



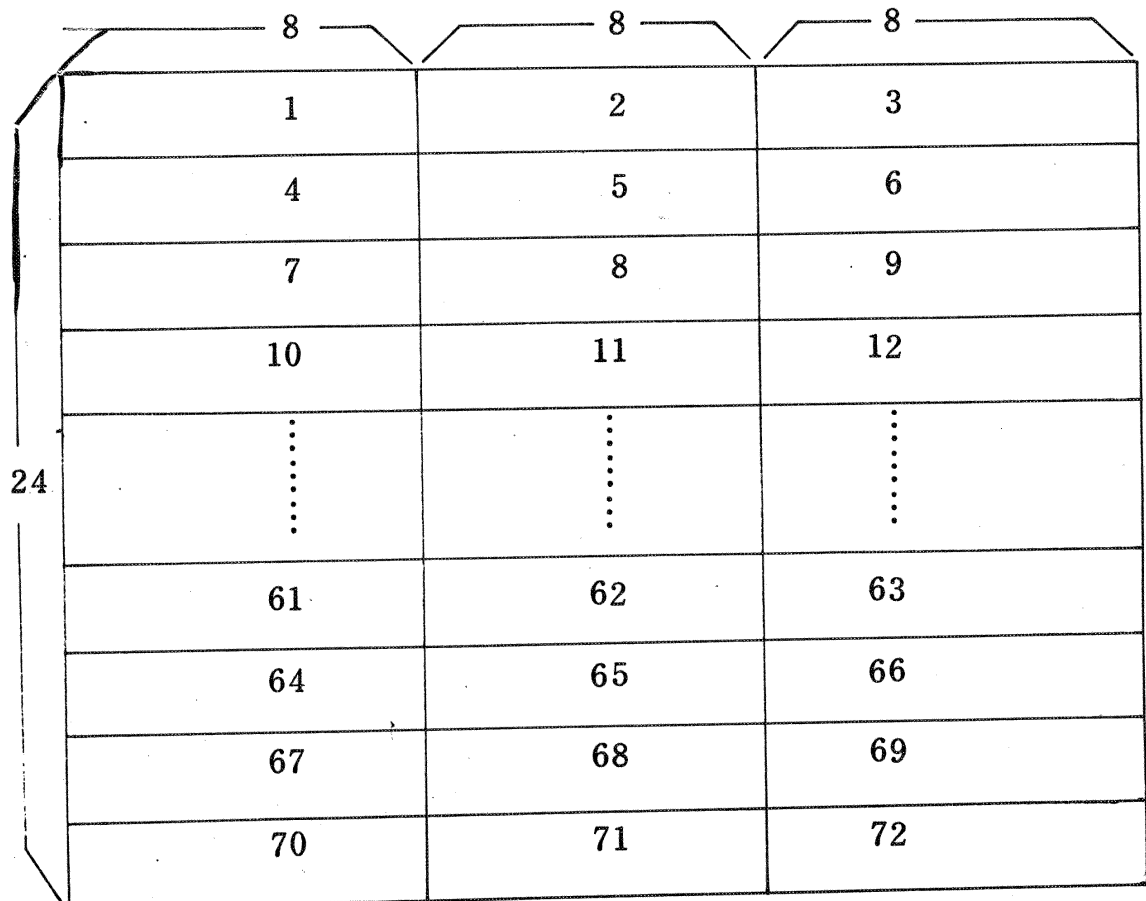
四、討 論

(一)本程式在模擬擴散實驗部份，主要目的在於生動，利用亂數在每一段距離內顯示數個點，再利用兩方速率的不同，而達到動畫的形態。唯一較不滿意者，在於此部份是由現知的一些公式及一些現象，製作程式來模擬擴散，無法與真正在實驗室所做的實驗相較。

(二)在模擬滴定部份，吾人在程式內容加入動態的畫面及聲音，以增加實際的效果。

(三)關於堆集晶形部份的中文字部份，如果常玩電腦的人，相信一眼就看出來是倚天中文的字形，其說明如下：

1. 倚天中文有一片為 24×24 字形片，是一個很大的位元組檔，每一個中文字佔了檔案中的 72 個 Bytes，而每個 Bytes 負責這一個中文字中的 8 個圖素（小點），若將這些 Bytes 編號由 1 到 72，則它們分別負責的區域如下圖所示：



是否覺得和 1. 中的 24×24 PATTERN 有點像呢？沒錯，如果長寬都是 24，就一模一樣了！如果把中文字的 72 個 Bytes 拿來，前面再加上 24, 0, 24, 0, 0, 0, 0, 0，那 True BASIC 就以爲是 BOX KEEP 取得的字串了，只要將此字串用 BOX SHOW 出來，就是一個中文字了。

3. 將程式中所要用的中文字由小而大排列，再利用每一個字的 BIG 5 碼算出它的 72 個 Bytes 在字形檔中的位置，並把這 72 個 Bytes 寫入另一個檔中，所有字都處理完畢後，即可得自己的字形檔。若要顯示某一中文字時，即可由它的大小排列的位置，求出它的 72 個 Bytes 的位置，將此 72 個 Bytes 前面加上 24, 0, 24, 0, 0, 0, 0, 0 再 BOX SHOW 出來就成了。

(四) 本作品在製作之初，先是使用精業 2002 電腦，但在接近大功告成之時（堆集晶形尚未完成）。卻發生記憶體不足的現象，而其中大都是中文系統佔去的空間，迫使「堆集晶形」部份必須分開處理。由於前車之鑑，後者（堆集晶形部份）與前者（實驗模擬部份）使用的系統有著極大的差別。

1. 不使用中文系統，（但畫面上卻仍然看得到爲數不少的中文字，此點已在前面做過說明）。
2. 改用 True BASIC 語言撰寫（前者使用傳統 BASIC，而 True BASIC 則是作者所知繪圖能力最強，且以檔案存取圖形最方便的語言）。
3. 使用高解析繪圖卡（因解析度較 CGA 卡的高）。

五、結 論

以電腦來輔助科學的研究，可以研究得更有效率，但從事電腦輔助基礎化學探討的人並不多，今後可以投入更多的人力，使化學研究電腦化，因此未來的發展具有很大的潛力，盼望有興趣的同學，一起投入這個行列，有更多的作品提出，以提昇基礎化學的水準。

六、參考資料

- IBM PC 使用手冊 松崗圖書公司印行 吳金榮編著
IBM PC BASIC 與應用 松崗圖書公司印行 林盛杰著
True BASIC 參考手冊 儒林圖書 T.E.K. 著 鄭光宗譯
高中化學原理一、二冊 東華書局 賴文雄 黃明隆著
新細說化學第三冊 建宏書局印行 薛勝雄編著

評 語

- (一)本作品利用電腦的繪圖功能模擬多體分子擴散、酸鹼滴定、電解等實驗，除有利於實驗過程的仔細觀察外，並可依不同條件之設計而得到確實結果。
- (二)金屬晶體的堆積晶形除模型外，很難確實表現其實際結構，本作品除有旋轉觀察各方位之相對圖形，並可以切割方法看出相關位置。
- (三)本作品可以推廣應用。