

臺灣二〇〇八年國際科學展覽會

科 別：電腦科學

作品名稱：烷類數位密碼

學校 / 作者：國立臺灣師範大學附屬高級中學 黃昱仁

自我介紹



我出生在一個幸福的家庭，有理性處理事情的父母以及一個年齡相仿的妹妹，這個家庭對我來說不僅是補充體力準備迎接社會中各種考驗的補給站，更是我心靈受創時的診療所。

而在我開始求學時，依據老師的建言[知識就是力量]，於是在這條求學的路程上更加用心、更加努力，在準備高中基測時曾經一度想放棄但是父親送給了我一句令我深思的話「犧牲享受，享受犧牲」，這句話堅定的我的心，讓我能在這條看似無止境的路上找到明燈。

我在於事情的處理上非常執著，若是沒有個完善的結果我勢不罷休，虎頭蛇尾的人在做各種事情時常常會拖累團體的士氣，讓大家都有放棄的念頭，所以我堅持我的堅持，只要是答應人家的事情我一定辦好，做不了的我也不會勉強答應，雖然不能讓人滿意但卻守住的自己的信譽。

目錄

自我介紹	P 1
目錄	P 2
摘要	P 3
研究動機	P 4
研究目的	P 4
研究設備以及器材	P 5
研究方法	P 5
研究過程	P 6
研究結果	P 1 1
討論	P 1 3
結論	P 1 4
參考資料	P 1 5

摘要

本研究主題主要是解決化學上複雜同分異構物的繪製以及其命名，因為物質在結構複雜時其同分異構物變化之多令人難以捉摸，於是我應用電腦強大的邏輯處理以及運算判斷的能力來讓電腦繪製。

以下是我想達成的目的：

- (1) 排列出分子式的同分異構物
- (2) 顯示出同分異構物之示性式、結構式
- (3) 預知尚未創造出物質的性質

研究中我創造出以下原則讓我方便達成研究

- (1) 數位密碼：為了讓電腦方便執行我使用數碼的方式表達各種同分異構物
- (2) 五大原則：此原則能讓不僅是電腦甚至是各個要繪製同分異構物的人都能有架構的繪製，不會遺漏任何的組成。
- (3) 3D顯示：透過X3D軟體的協助我能讓使用者透過立體的方式了解到物質的結構。

The purpose of this research is to solve the problem of Isomer's structure drawing and named problem. It's hard to predict the status of complex Isomers, so we use the powerful logic and calculational ability of computer to draw the structure of Isomers.

The following points is the goal that we want to reach

- (1) Arrange the structure of the Isomer's formula
- (2) Show structural formula of Isomers
- (3) Predict the chemistry of things that haven't been created

During our research, we create the following principle to help us do the research

- (1) Digital Codes: In order to let the computer to run the process, we use digital codes to express all the Isomer's formula.
- (2) The "5 Rules": The 5 rules can help not only computers but all the people who try to draw the structure of Isomers without losing any of compositions.
- (3) 3D Display: Helping our user to understand the structures of materials with the 3D images producing by the "X3D".

研究動機

壹、延續去年研究之成果

- 一、去年已經完成了烷類部份的同分異構物，而在之前所發下的願景今年決定逐一實現，在原有的基礎上更進一步推廣到常見有機化合物，以及能夠在行動設備上執行，而因為範圍擴大為有機化合物，感到繪製同分異構物更加的複雜，但是也因為越是複雜我所製作出來的東西才會越有價值，於是我開始埋首於研究常見有機化合物以及 pda 平台的移植。

研究目的

一、人與人之間的溝通

- 1、我把各種有機化合物透過程式來達到編碼以及解碼的動作，透過這個動作能以一串的編碼表達此種物質，這樣的一串編碼比起他所代表的各種特性以及內容在於空間的使用會更為精簡，若往後此種編碼結構廣為人利用，因為其儲存所需要的小空間在於傳送資料以及遠距溝通方面都會是很便利的工具。

二、解決有機化合物同分異構物排列

- 1、往日在排列同分異構物時容易有遺漏且常常令人苦惱到底缺少了何種判斷，例如在最簡單的烷類上，當碳數達到 10 的時候就已經有 75 個之多，而碳數達到 12 時更有 355 個之多，由於我能夠完整的表達此有機物質結構中碳的位置，因此可以利用一套邏輯進而讓電腦自動排列此化合物之同分異構物，藉此能夠解決學生在學習上的瓶頸。

- 三、現在的科技對於各種物質有很多已經能使用人工的方式來合成，但是對於廣大的世界來說，人類所能製作出來的只能說是小巫見大巫，並沒有辦法把所有物質都製造出來，但是我運用電腦高效能的運算，能讓電腦組織出還未見過的物質，進而當科學家研究的同時可以作為參考，讓許多現在認為不可能出現的物質變為可能，讓無法測量的物質能判斷出他的特性，讓化學與電腦結合使化學界的里程碑更上一層樓。

研究設備以及器材

壹、硬體

- 一、電腦（兩台）
- 二、有機化學書籍（三本）
- 三、Visual Basic 程式設計書籍（兩本）
- 四、Visual Basic 資料庫設計書籍（一本）
- 五、印表機（一台）
- 六、隨身碟（兩台）
- 七、P D A（一台）

貳、軟體

- 一、Microsoft windows XP
- 二、Visual Basic 6.0
- 三、eMbedded Visual Basic 3.0
- 四、X3D

研究方法

分類

一、只含碳氫之有機化合物烴類

(一)鏈狀烴

1.飽和烴

(1) 烷系

研究其結構異構物之變化並且研究出排列規則

2.不飽和烴

(1) 烯系

由於此為雙鍵且會出現順反異構物以及雙鍵位置變化，需要更新規則

(2) 炔系

此項雖為參鍵但是不會有順反異構物的考量

(二)環狀烴

1.脂環烴

(1)環烷

(2)環烯

2.芳香烴

(1) 苯系

(2) 萘系

(3) 蒽系

二、含官能基之有機化合物

1. 醇類 $R-OH$

甲醇 CH_3OH

2. 醛類 $R-CHO$

甲醛 $HCHO$

3. 酮類 $R-CO-R$

丙酮 CH_3COCH_3

4. 酸類 $R-COOH$

甲酸 $HCOOH$

5. 醚類 $R-O-R$

甲醚 CH_3OCH_3

6. 酯類 $R-COO-R$

甲酸甲酯 $HCOOCH_3$

R 為基礎之不含氧之烴類

研究過程

壹、化學方面

- 一、分類完畢後開始分工著手進行各類別之研究，找出各種類別之明顯差異性，而研究越深入後發現越多問題，而其中最急迫需要解決的便是每一個種類中，相同的元素卻有很多種之同分異構物，於是以排列烷類之經驗擴展到有機化合物，同樣的爲了要讓電腦能自動排列，我著手進行製圖的工作，因爲假使我畫不出來又如何能寫出程式讓電腦來執行。
- 二、我繪製從碳數少的沒有同分異構物，到碳數大的有幾百個同分異構物，在這些我所繪出的圖中找尋他的規律性，希望能夠統整出一套有系統的理論，進而寫成程式讓電腦執行，經由這個過程我不斷的嘗試、累積經驗終於被我發現了架構同分異構物的五大原則，而且絕對是可行、迅速、正確。
- 三、基礎完畢之後開始加入雙鍵、參鍵，以及各種常見之官能基，範圍一下子便增廣了許多，從少兩個氫開始到少四個氫，於是二度的統整出理論，以及創建新的密碼結構，使之能配合更多的有機化合物。

貳、資訊方面

- 一、在開始撰寫前繪製流程圖讓思路更清晰，更能明瞭下一步該如何寫，且對於電腦的理解方式也更能清楚知道，讓寫程式時不會不斷的發生錯誤，對電腦下的每一指令也避免造成矛盾。
- 二、從網路上參考查詢分子式的軟體，發現它們皆採用資料庫的方式來一筆一筆土法煉鋼，辛苦的把圖形、命名儲存於電腦中，而這種方法對於化合物無限擴展的世界，這無非是需要極大的儲存空間以及龐大的人力來共同建立這個資料庫，況且其資料在大於 12 個碳時便殘缺不堪，於是我不願意如此做，便開始思考著如何把這些(視覺化)的東西用最簡易的(數位化)來儲存，並且能做到完整的呈現，故我開發出了

這套有機化合物數位密碼以節省空間且加快查詢速度。

三、爲了移植到行動設備上，於是我多方詢問以及搜尋資料後，使用 eMbedded Visual Basic 來開發行動設備的軟體

四、利用數位密碼來讓電腦排列出我想要的東西，此密碼爲

1、主鏈

↓ 後三碼最長碳鏈數

M	M	M	0	0	8
---	---	---	---	---	---

↑ 前三碼表示主鏈之類型 M開頭爲長鏈 C開頭爲環

2、官能基

↓ 前三碼表官能基

Y	0	0	0	0	4
---	---	---	---	---	---

↑ 後三碼表官能基在主鏈上位置 若爲Y00給予000

Y00無

Y10醇 Y20醛 Y30酮 Y40醚 Y50酸 Y60酯

3、鍵別

↓ 第一碼表連結鍵之種類 二、三碼表鍵結位置

D	0	2	0	0	0
---	---	---	---	---	---

↑ 後三碼表有無順反

前三碼

DXX表雙鍵 TXX表三鍵 000表全爲單鍵

後三碼

000表無順反 111表順 222表反

4、支鏈

↓ 前兩碼表接在主鏈之位置 第三碼表方位 A下 B上 L左 R右

0	2	A	0	0	2
---	---	---	---	---	---

↑ 後三碼表數量

五、程式撰寫要點

(一) 含多鍵異構物之判斷

1. 排列時先變換雙鍵以及三鍵之位置，若無外接須透過左右對稱重複檢驗

例： $C=C-C-C-C-C$

此物之密碼 MMM006Y00000D01000

中文名稱 1-己烯

2. 處理順反異構物

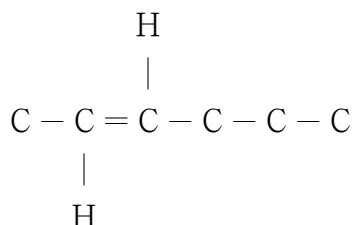
因爲雙鍵無法旋轉於是會出現順反異構物

例： $C-C=C-C-C-C$



此物之密碼 MMM006Y000000D02111

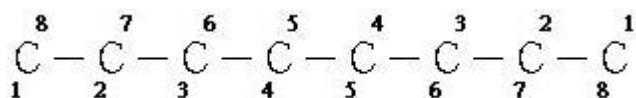
中文名稱 順-2-己烯



此物之密碼 MMM006Y000000D02222

中文名稱 反-2-己烯

(二) 結構異構物排列原則



1. 左右對稱重複

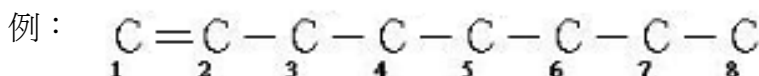
(1) 外接之碳鏈絕不能有重複之情形，如重複則刪除。

例：外接於2 和外接於7 之位置視為相同

MMM008Y00000000000002A001 和

MMM008Y00000000000007A001 視為相同（參照上圖）

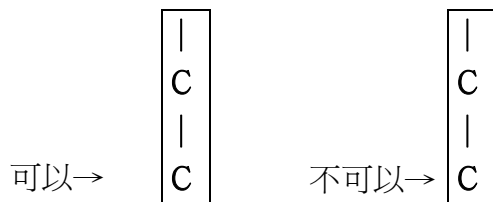
(2) 若為多鍵則無此條件，因其有多鍵固有方向之分，編號須固定



2. 最小短碳原則

(1) 外接之任何一碳鏈不得大於其左右兩邊任一碳鏈之長度。

(2) 外接之任何一碳鏈長度等於其左右兩邊任一碳鏈時，其總碳數不得超過左右兩邊任一碳鏈之總數。



3. 延續排列原則

(1) 數位密碼沿用上階密碼結果繼續排序，但末一位不可小於前一位。

例：MMM008Y00000000000003A00103B001 可

MMM008Y00000000000003A00102A001 不可

4. 異側排列原則

(1) 附加碳之最後一碼先排 A 在排 B 先排 L 在排 R

A	接在長鏈之下方
B	接在長鏈之上方
L	接在外接長鏈之左方
R	接在外接長鏈之右方

5. 上下對稱重複

(1) 外接之碳鏈絕不能有重複之情形，如重複則刪除。

例：MMM008Y0000000000003A002 ←取此

MMM008Y0000000000003B002 ←此刪除

以上兩者為重複取接在長鏈下方多於上方者。

六、程式的開發

(一) STRZERO(num As Long, lenth As Long) As String

num 為輸入之數值，lenth 為設定之長度

由於我利用數字密碼來排列，這個副程式便顯的格外重要其功能是可以先設定要取的位數，並把輸入的數字轉換成文字，不夠的部分補零，可用於西元年轉民國年以及其他副程式的開發許多都需用到它。

例：strzero(1234,5)=" 01234"

(二) CHDATE(num As Long) As String

num 為輸入之數值

透過 strzero 的轉換配合數字密碼能自動把各種同分異構物給予中文命名。

例：CHDATE(0050020)=2-甲基-戊烷

(三) IUPAC(num As Long) As String

num 為輸入之數值

透過 strzero 的轉換配合數字密碼能自動把各種同分異構物以 IUPAC 的規則給予英文名稱。

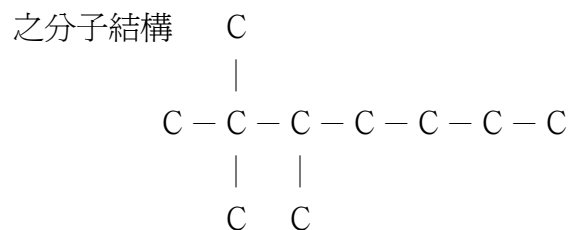
例：IUPAC(0050020)= 2-METHYLPENTANE

(四) DSPANE(CCP As Long) 顯示有機化合物分子結構式

CCP 為所有機化合物數字密碼指標

例：在碳數=10 中，若指標給定為 20，則為

MMM007Y0000000000002A00102B00103A001



(五) DSPLIST(CCP As Long) '顯示有機化合物的中文和 IUPAC 命名並
CCP 為所有有機化合物數字密碼指標

例：在碳數=10 中, 若指標給定為 20, 則為

MMM007Y0000000000002A00102B00103A001

之中文名稱和 IUPAC 命名、實驗式、分子式

(六) RERAGE(SSS As String) As String '重新排列碳位(利用 SELECT SORTING)
SSS 為要排列的有機化合物數字密碼

例：SSS= MMM009Y0000000000003A00103B00103A001 則重排後為

RERAGE= MMM009Y0000000000003A00203B001

(七) SIMQRY(CNFF As Long, SSS As String) As String '對稱區找出是否有相同的
CNFF 為串碳數即擁有相同長碳者,SSS 要比較的對稱字串

SIMQRY 傳回結果為 1.Y(找到相同字串),2.N(無相同字串)

例：比較 ARRAY---SIMC(N1,N2)

(八) SIMQRY2(CNFF As Long, SSS As String) As String '產生區找出是否有相同的
CNFF 為串碳數即擁有相同長碳者,SSS 要比較的對稱字串

SIMQRY2 傳回結果為 1.Y(找到相同字串),2.N(無相同字串)

例：比較 ARRAY---ISOC(N1,N2)

(九) ISOPRV(CCP As Long) '找出上階適合之組合資料

CCP 脫離鏈的碳數故上階選用 CCP-1

1.檢查上階中最長碳是否已不符原則—延續排列原則

2.找出最小號的可接位置

3.最小碳要考慮左側和右側的碳位

4.考慮雙鍵三鍵以及環之位置處理

(十) ISOCADD(CCPN As Long, NNAL As Long) 新鏈加法處理

CCPN 為外接碳數, NNAL 為串碳開始位置

排列原則請參照

四之(一) 排列原則

參、遇到的瓶頸

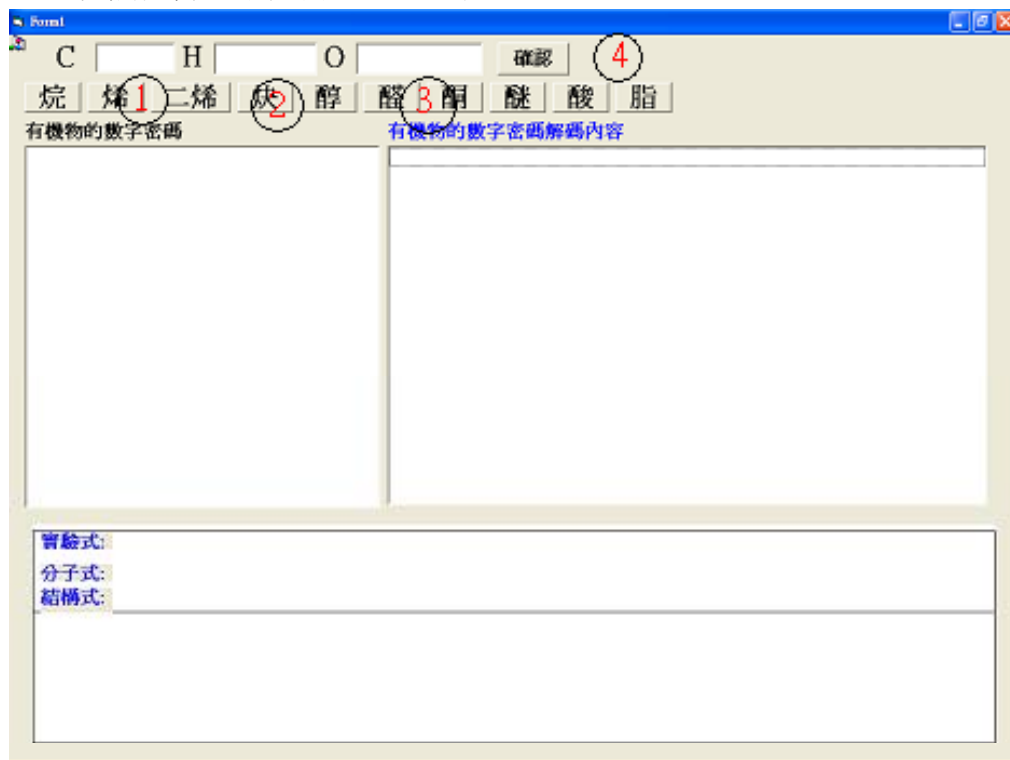
一、許多之前未見過的物質

二、化學書本上的理論更深

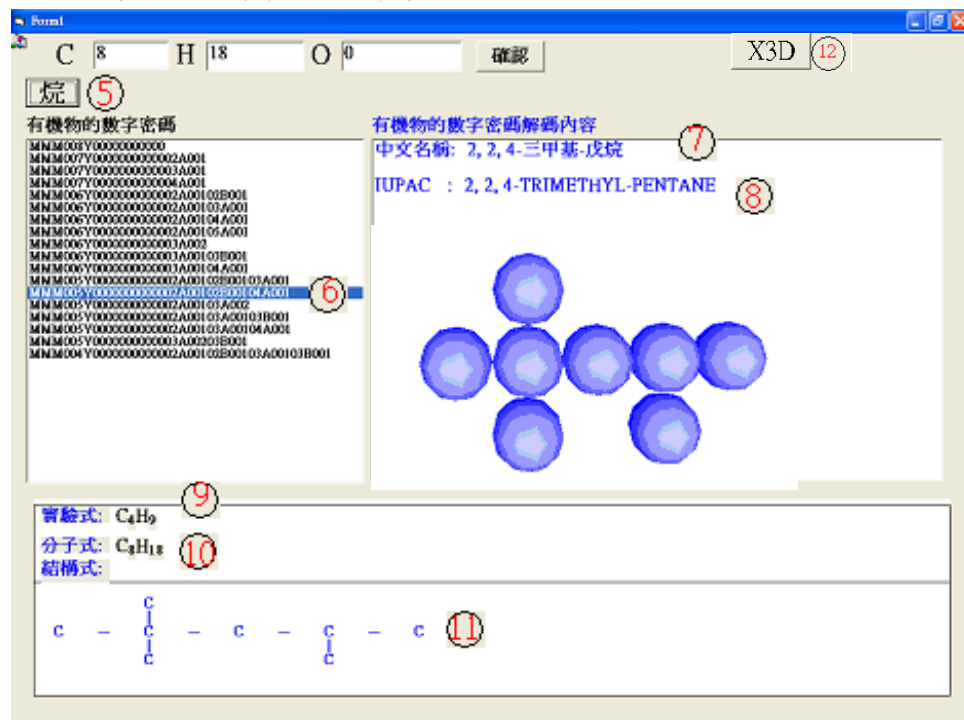
三、各種同分異構物的複雜結合

研究結果

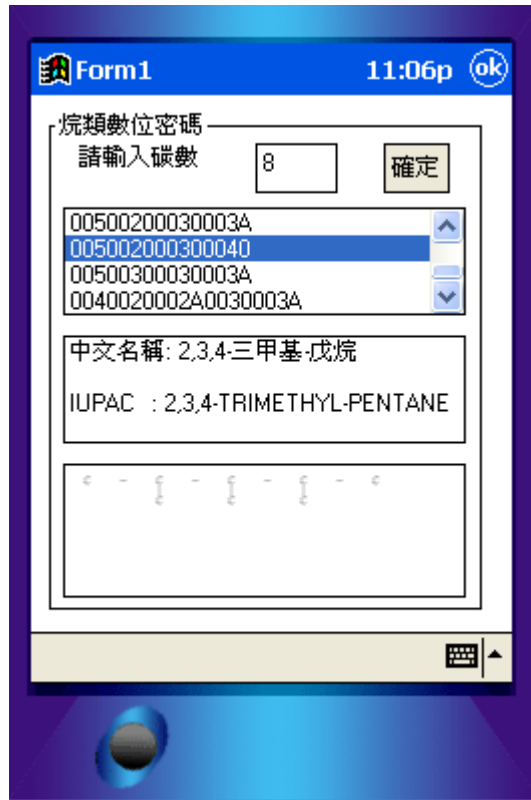
壹、有機化合物數位密碼查詢系統



- 1、輸入碳數
- 2、輸入氫數
- 3、輸入氧數
- 4、確定後開始判斷可能之有機物



- 5、因輸入之各種元素的數量只有可能為烷類，故只剩下烷
- 6、選擇其中一同分異構物
- 7、顯示中文名稱
- 8、顯示英文名稱
- 9、顯示實驗式
- 10、顯示分子式
- 11、顯示結構式
- 12、若為烷類提供3D結構式，會顯示X3D之選項



一、 使用eMbedded Visual Basic 3.0在 windows上模擬pda情況，把舊版程式成功移植到pda

程式實際在pda上執行的情況



討論

壹、化學部分

- 一、本次成果已經把雙鍵、參鍵以及常見的官能基放入了程式中，使得內容更加趨近於多樣化，在於利用上也更為方便。
- 二、本程式所使用之五大原則所產生的同分異構物數位密碼，對於碳數 1~10 以及氫數少最多值 2 或 4 皆能正確無誤的表示出來，但對於是否還有存在其他規則，由於目前研究的樣本不足，像是對於碳數超過 10 之部分，雖然也能正確無誤列出來，但還無法得知是否有遺漏。
- 三、對於目前我所能列出的分子結構如何補充其物理性、化學性以及各種不存在規律之資料仍是一大工程。

貳、程式部分

- 一、未來開發於網路、手機的版本，需要利用到(.NET、JAVA···)之程式語言，也要開始進行其了解以及學習。
- 二、假使放置於網路上，將可借助網路使用者之力量，來擴充我分子式中物理性與化學性之簡介說明。

參、編碼和解碼程式

- 一、由於化合物之數位密碼是先經由程式編碼產生後，當使用時再進行解碼，所以編碼與解碼之程式是否能達到最佳效率是仍可以提升的部分。
- 二、由於隨著功能越來越強大，所包括的元素也會越來越多，如何能讓編碼達到所有元素化合物皆能共用也是我努力的目標。

結論

壹、作品成果

- 一、首創排列有機化合物結構異構物以及順反異構物之五大原則。
- 二、將同分異構物之結構由視覺上的圖形轉換為數位的方式來儲存，不再是將圖形排列出來後附上命名再將其儲存於資料庫的方式表現，現在只需告訴電腦數位密碼，電腦便能自動轉換。
- 三、這次的作品已經是一套簡易有機化合物的查詢軟體，透過電腦高效能的運算效率，只要宣告碳、氫、氧數量就能由電腦自動排列組合出各種人腦需花費大量時間排列的同分異構物，且把自動排列出來的化合物給予英文及中文的命名。

貳、本主題延續

- 一、現在我大致上完成了有機物查詢軟體的基礎，話說沒有穩固的基礎哪裡來穩固的大樓？建立了好的基礎，就是我持續發展下去的踏板，無論這次的科展對於別人來說是如何的不完整，但是對於我來說這是到達完美的必經過程，相信往後一定會有比現在更亮眼的成果。
剩餘的環狀有機化合物同分異構物大致還缺少，因在環的判斷上還不盡完美，我人腦無法搞定，便難以移植到電腦上，但是我已經有雙鍵以及參鍵，在於繪製同分異構物的領域已經又是新的里程碑。
- 二、下次的延續會陸續把各種少見官能基以及環的判斷加入查詢的系統，且擴充介紹化合物特性的內容，使得簡介更為完善，並且使系統的查詢能更多元化，例：輸入中文命名、英文命名，使系統能更廣為使用。

參、研究的感想

- 一、雖然在研發這套系統途中遇到了許多的問題，但是一想到這可以使許多人獲益，能有這樣的成就感，就算讓我多熬幾個夜，少作一些休閒都不算什麼，而在完成後我想最大的受益人還是我自己，不僅在化學的學習上達到潛移默化的效果以及在寫程式上的功力獲得進步，更重要的是我能清楚整理自己的思緒並且轉換成程式碼。
- 二、現在我看到其他軟體所執行的任何一項工作，我不會像以往一樣認為是理所當然，而是開始在腦子中架構這樣的指令它是如何使電腦作用，清楚的了解撰寫一個程式所需的步驟，剛開始要廣為蒐集相關製作內容之資料，接下來分析、整理這些取得的資料，然後構置流程圖、把想法轉變為實際的程式碼來撰寫，再來就要不斷的測試是否有BUG之存在，然後經由調整、美化，展現出最後成果。

參考資料

壹、化學部分

一、書籍

- (一) 高中化學葵花寶典 1 1 有機化合物 (I)
(高中大學出版中心)
楊慕文 編著
- (二) 高中化學葵花寶典 1 2 有機化合物 (I I)
(高中大學出版中心)
楊慕文 編著
- (三) 有機化學
(文京圖書) 有機化學編輯委員會
林經綸, 陳昭雄, 楊靜儀 編著

二、網路

- (一) 有機化合物之分子結構
<http://www.cheric.org/kdb/kdb/hcprop/listcmp.php?cmpclass=2>

貳、資訊部分

一、書籍

- (一) 程式語言寶典 Visual Basic
勁園文化事業 台科大圖書
張炳雄, 徐明志, 黃慧容 編著
- (二) Visual Basic 6.0 程式資料庫設計
旗標出版
王國榮 著

評語

實作完整，包括電腦版本及 PDA 版本均可實際運作。

但此主題與化學背景極度相關，建議將名稱改爲「化學教育軟體相關」之名稱較更爲貼切。

並且所應用之核心技術與電腦教不相關。