

第18回全国高等専門学校プログラミングコンテスト自由部門予選出展作品

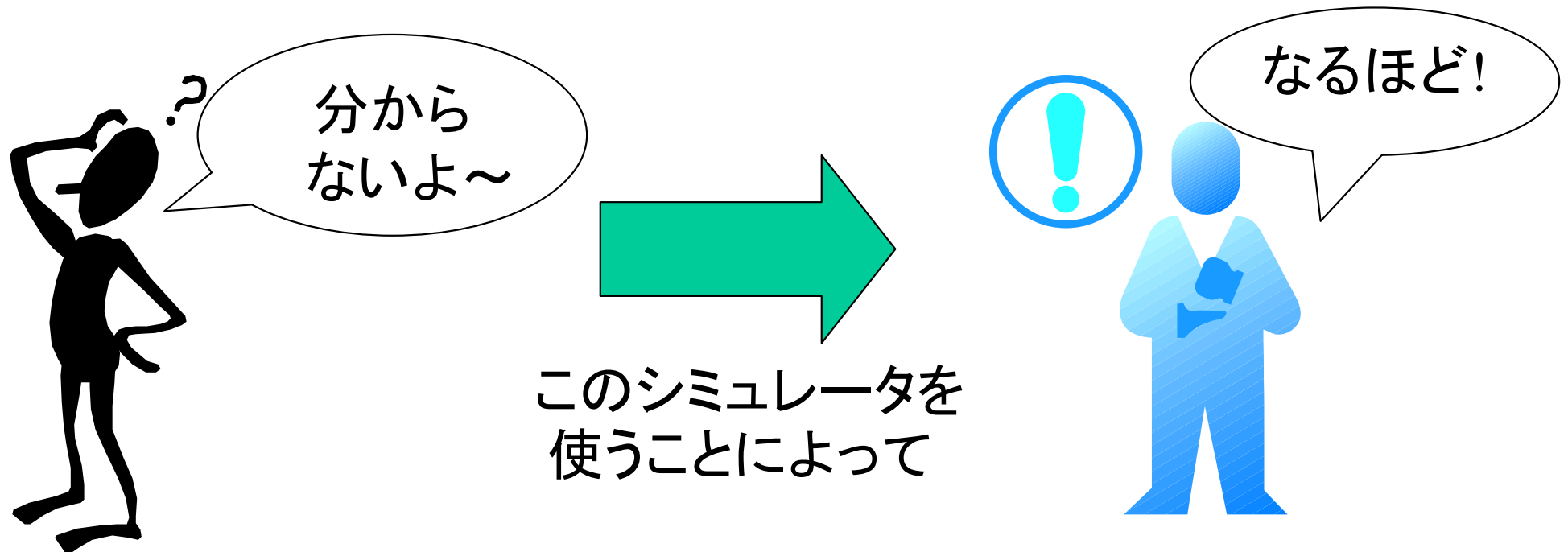


- 化学反応シミュレータ -

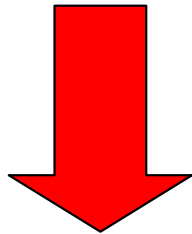
登録番号 20014

中学や高校で化学反応を暗記する時に覚えられなくて困ったことはありませんか？

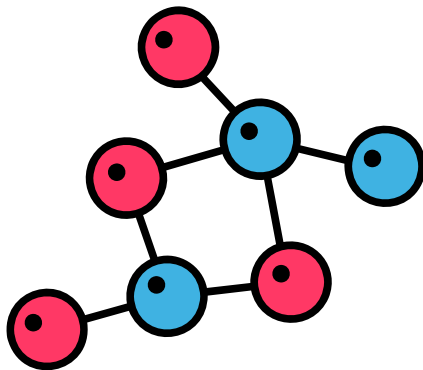
この**化学反応シミュレータ『まじかる☆モルერთくん』**を使えば、教科書に載っているような、文字だけではイメージしにくい化学反応を**3D表示**によって直感的・視覚的に学ぶことができます。



『まじかる☆モルერთくん』の概要



原子や分子、化合物を
組み合わせると...



分子、化合物が
完成！

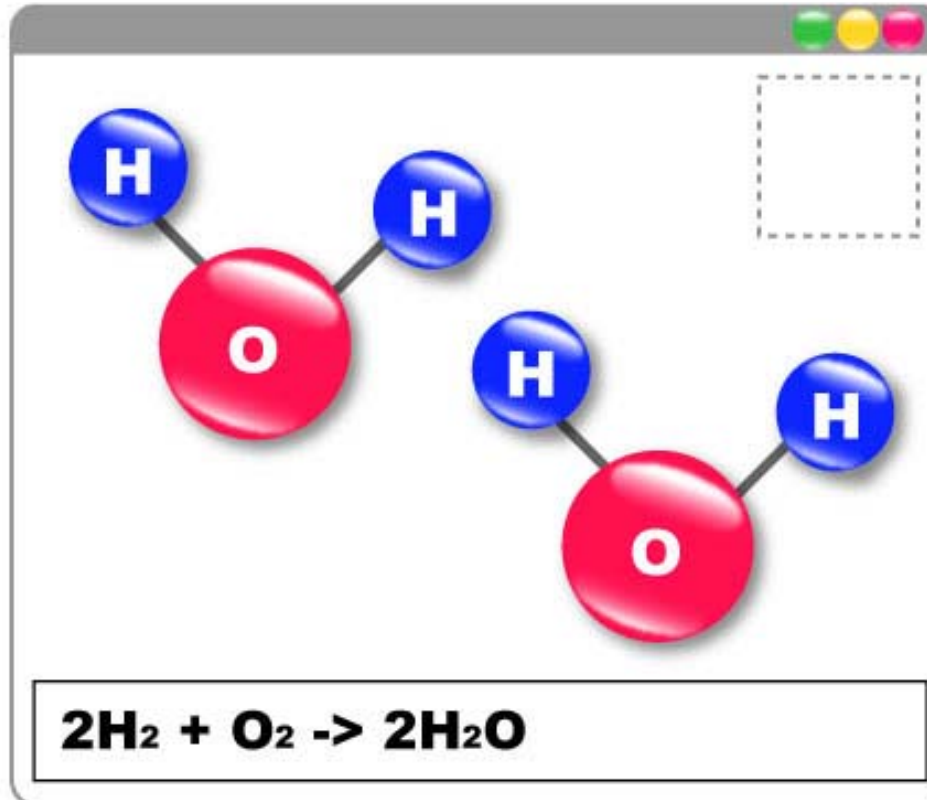
- 『まじかる☆モルერთくん』は主に中高生の学習をサポートする**化学反応シミュレータ**です。
- 原子**を組み合わせることによって、**分子・化合物を作成**することができます。
- また、**分子・化合物**から、新たに**化合物**を作ることもできます。
- 作成した化合物の**構造と反応式**が表示されることにより、画像と式を結び付けて、視覚的に化学反応を覚えることができます。

画面構成



A window with a title bar containing three colored buttons (green, yellow, red). The window contains a list of chemical formulas:

- H2
- O2**
- H2O
- NaOH
- NH3
- NH4Cl
- NaNO3
- K2CO3
- KOH
- HCl
- Mg(OH)2
- AgNO3
- C2H4O2



A window with a title bar containing three colored buttons (green, yellow, red). The window displays a ball-and-stick model of the reaction $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$. The model shows two hydrogen molecules (each with two blue spheres labeled 'H') and one oxygen molecule (with two red spheres labeled 'O') on the left. On the right, two water molecules are shown, each consisting of one red sphere labeled 'O' and two blue spheres labeled 'H'. A dashed rectangular box is present in the upper right corner of the window. Below the model, the chemical equation $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ is displayed in a white box with a black border.



A window with a title bar containing three colored buttons (green, yellow, red). The window contains two chemical equations:

- $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$
- $\text{NaOH} + \text{HCl} \rightarrow \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$



A periodic table of elements represented by colored buttons. The elements are arranged in rows and columns:

- Row 1: H (blue), He (blue)
- Row 2: Li (pink), Be (pink), B (pink), C (pink), N (blue), O (blue), F (blue), Ne (blue)
- Row 3: Na (pink), Mg (pink), Al (pink), Si (pink), P (pink), S (pink), Cl (blue), Ar (blue)
- Row 4: K (orange), Ca (orange), Sc (orange), Ti (orange), V (orange), Cr (orange), Mn (orange), Fe (orange), Co (orange), Ni (orange), Cu (orange), Zn (orange), Ga (pink), Ge (pink), As (pink), Se (pink), Br (blue), Kr (blue)
- Row 5: Rb (pink), Sr (pink), Y (orange), Zr (orange), Nb (orange), Mo (orange), Tc (orange), Ru (orange), Rh (orange), Pd (orange), Ag (orange), Cd (pink), In (pink), Sn (pink), Sb (pink), Te (pink), I (pink), Xg (blue)

原子から分子を作る

①



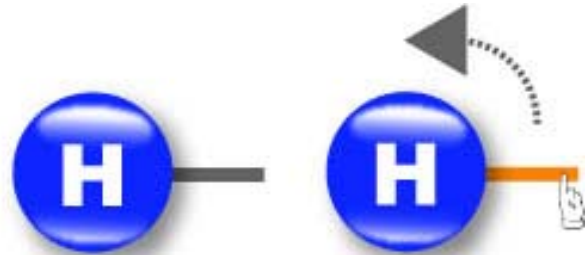
原子表から、原子を選択する

②



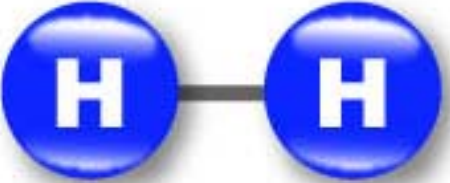
原子が生成される

③

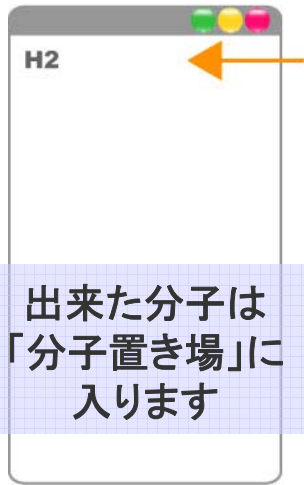


原子の足をくっつける

④



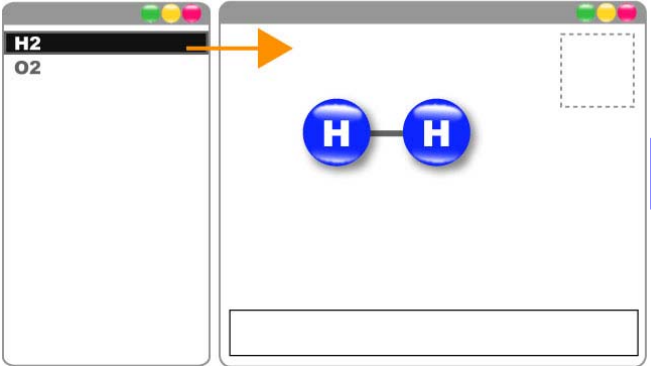
分子完成！



出来た分子は「分子置き場」に入ります

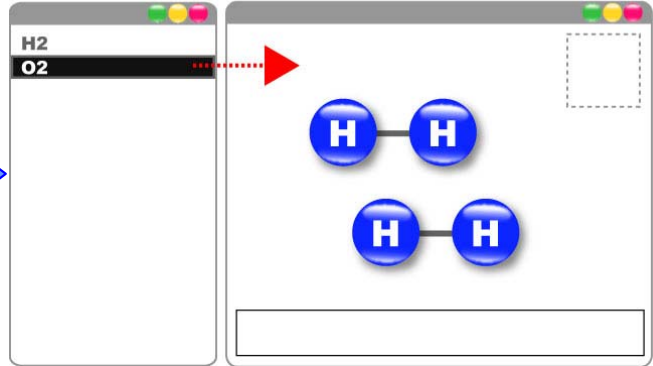
分子から化合物を作る

①

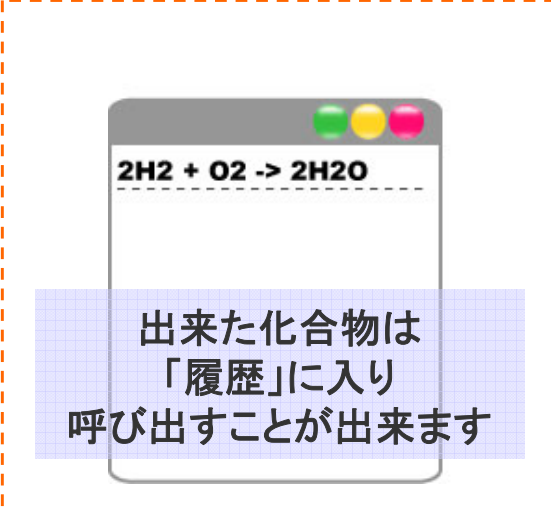


分子置き場から分子を選択

②



反応する分子を持ってくると…



出来た化合物は「履歴」に入り呼び出すことができます

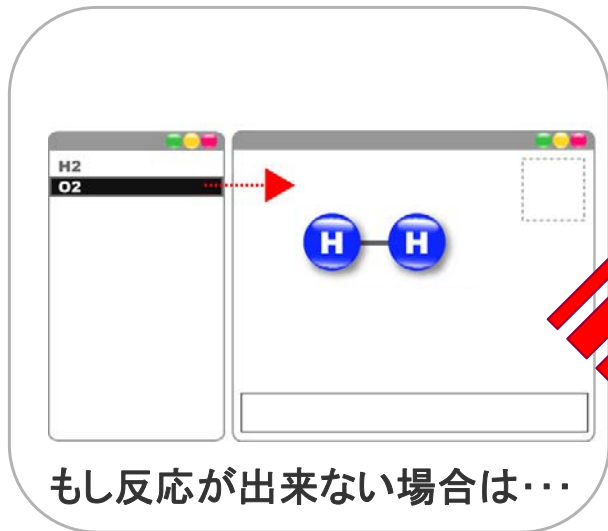
③



化合物が完成！

反応が出来ない場合

例) $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \dots$

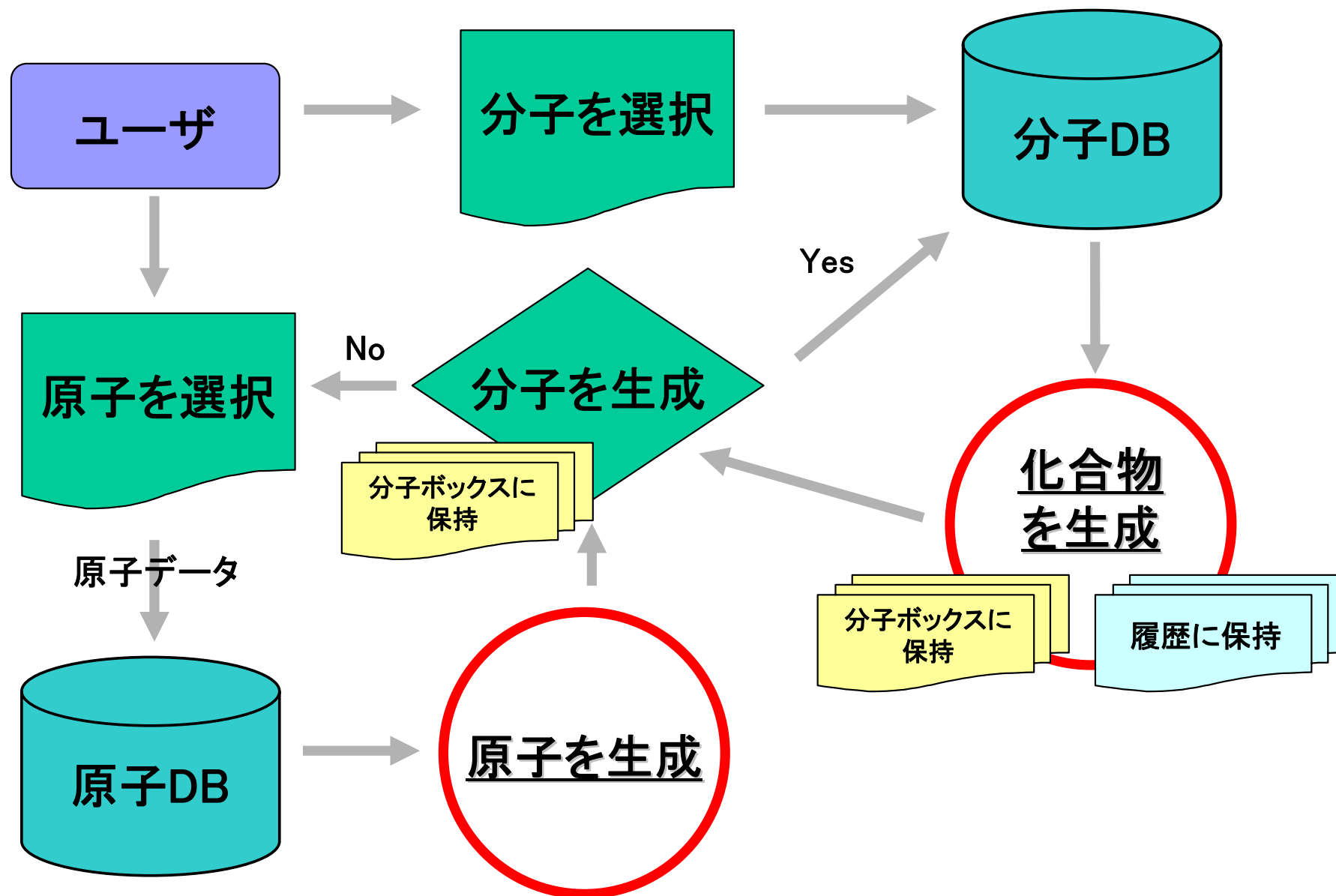


* $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$
となってしまう、Oが単体で残ってしまうため反応できません



エラーメッセージと
ヒントを表示します。

データフロー



独創的な部分

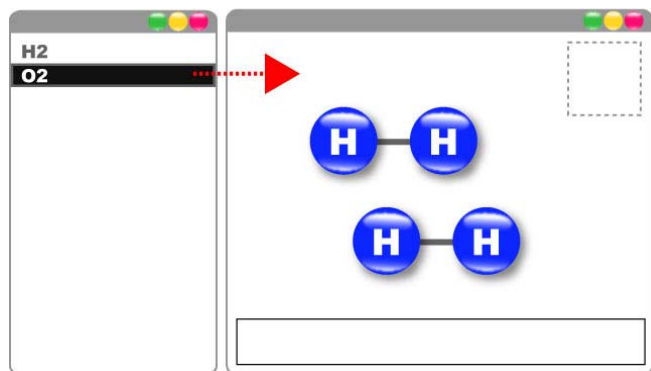
- パソコン上で原子を組み合わせて分子・化合物を3次元CGで表示することによって、直感的・視覚的に学習できます。
- 実際に自分の手で化合物を作るので、ただ式を見せられるより、興味を持ちやすくなります。
- 3次元CGで作られた分子モデルは移動・回転などでき、様々な視点から見ることができます。

これは素晴らしい！



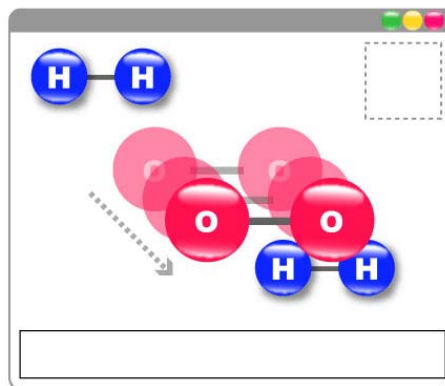
反応のアニメーション表示

①



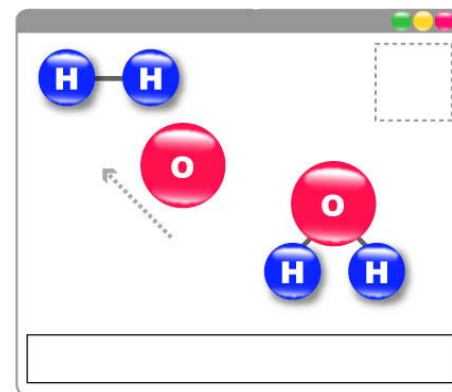
反応する分子を持ってくると

②



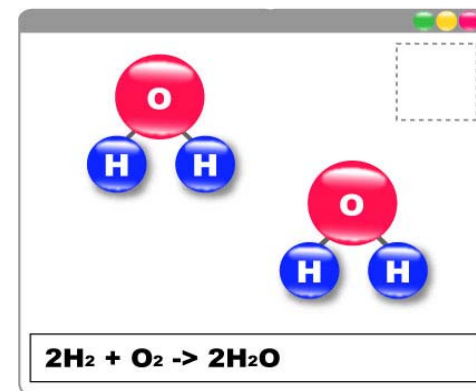
分子同士がぶつかり…

③



分子が2つに分離して…

④



化合物が完成！

通常の学習では、分子と分子がどのように反応しているかを知ることは困難です。

このソフトを用いれば、単に原子や分子が反応する結果のみを表示するだけではなく、

どのように反応しているかという過程を

アニメーションで見ることができます。

類似品との相違点

•CS Chem3D (CambridgeSoft)

- 化学物質のモデル図を作成するために開発されたグラフィックアプリケーション
- 化学構造式を入力するだけで立体モデルに変換できる

『まじかる☆モルルートくん』の場合、化学構造式を入力するのではなく、自分の手で分子・化合物を組み立て、その構造を表示します。

•糖タンパク質データ集 (県立新潟女子短期大学 本間善夫研究室)

- 糖を含むタンパク質の立体構造を表示するデータ集
- 一覧の中から選択したものの立体構造を表示する

『まじかる☆モルルートくん』の場合、一覧の中から決められた分だけ選択・表示するのではなく、データベースを参照しているので、新たに分子・化合物を追加することが容易です。

開発環境・動作環境

- **対象者**
 - 化学を習う中学、高校生
- **開発環境**
 - 使用OS Microsoft Windows XP
 - 使用言語 Visual C++.NET2003
 - グラフィックAPI OpenGL
- **動作環境**
 - VGA以上のディスプレイ
 - Windowsが動作するコンピュータ (.NET Framework 1.1)

