

教育類自由軟體及 自由教材之簡介

化學生物類

(2009年5月版)

作者：日內瓦一條牛（江易原）

釋出日期：2009年5月

著作權：

本文件除所引用他人自由授權之著作無權並更外，其餘皆為笨牛之著作，採一年之自由授權

2009年5月到2010年4月30日23時59分59秒止，採BSD及CC-Attribution自由授權（任何人得以自由複製，散佈，轉寄，修改，販賣，唯一限制是必須標明作者）。

2010年5月1日起進入Public domain（公共領域/公共財），不接受著作權法保護，可以從事任何用途，不受限制。

謹將此文件獻給

先知先覺的自由精神創立者與領導人

後知後覺自由授權追隨者（如笨牛之輩）

以及

不知不覺的自由產物使用者

目 錄

前言.....	5
有關作者笨牛.....	5
特殊著作權聲明.....	7
有關 Tryneeds/Wekey 團隊.....	9
第 1 章 Chemical Structures in SourceForge.net--有機化合物資料庫.....	11
1-1 有關 Chemical structures.....	11
1-2 Chemical Structures 首頁及線上分子展示.....	13
1-3 基本看圖功能.....	16
1-4 使用其他軟體讀取化學檔案.....	18
1-5 下載及使用 Chemical Structures.....	19
1-6 在高中化學教學應用之建議.....	21
第 2 章 Crystal Lattice Structure 無機化物結晶圖.....	22
2-1 有關 Crystal lattice Structure.....	22
2-2 線上使用.....	22
2-3 如何將圖形輸出，用在文件，簡報，或網頁.....	27
2-4 其他可用在高中化學的晶體圖.....	27
第 3 章 PhET 互動式教學軟體.....	28
3-1 有關 PhET.....	28
3-2 線上使用或下載安裝.....	29
3-3 pH 值的觀念教學.....	32
3-4 鹽與溶解度教學.....	37
3-5 可逆反應的教學.....	40
3-6 化學反應與反應速率.....	42
3-7 其他化學主題.....	44
第 4 章 Avogadro 超強的化學立體分子繪圖，看圖，教學軟體.....	45
4-1 有關 Avogadro.....	45
4-2 基本繪圖功能.....	46
4-3 Avogadro 的顯示功能.....	49
4-4 由分子資料庫匯入圖形.....	53
4-5 讀取現成的化學分子檔案.....	54
4-6 輸出高品質的分子圖片及其他圖片格式.....	54

第 5 章 Gchemutils-多合一的化學軟體.....	56
5-1 化學計算機 Gchemcalc.....	57
5-2 化學週期表 Gchemtable.....	59
5-3 平面化學繪圖軟體 Gchempaint.....	60
第 6 章 Protein Data Bank 生化分子資料庫.....	64
6-1 有關 Protein Data Bank.....	64
6-2 線上使用簡介.....	65
第 7 章 原子與分子軌域教學軟體 (Learning Atomic and Molecular Orbitals).....	68
7-1 有關 Falstad's java applets	68
7-2 氫原子軌域教學 (Atomic Orbitals).....	70
7-3 分子軌域教學 (Molecular orbitals).....	73

前言

非常感謝教育部孫賜萍老師，一次摧毀笨牛一百個偷懶的藉口，讓阿牛重新回到寫自由軟體使用文件的路上。感謝台大化學系陳竹亭教授的推薦，教育部高中化學學科中心（高雄中學）及嘉義高中的支持，加速這份化學生物類文件的進度，此外，花蓮教網蕭維紀老師協助這次化學學科中心教學光碟的製作，讓更多人體會到教育類自由軟體的好處，笨牛萬分感謝。然而因為笨牛個人因素，無法及時完成本文件，所以稱作測試未完成版，希望未來有時間可以釋出正式版（阿牛需要大家的鞭策）。

上次的笨牛手冊第1版（2008年版），[自由軟體及OpenOffice.org於中小學教育之應用](#)，於2008年1月完成釋出後至今沒有再修改或有新東西，即便我又發現不少更棒的自由軟體或是自由授權的網站及資料，也不能立刻更新。剛好這次機會，把該更新的，新發現的都寫進來。現在又有Tryneeds中文化團隊的協助，幫更多好用的軟體加上中文介面，讓更多人可以享受自由軟體。因為這次任務特殊，所以將本次自由軟體應用文件分為幾個部份，包括化學及生物類，數學，物理，天文，地理與環境科學，高等教育等，看起來包山包海，包到自己都很心虛。不過沒關係，寫的不好請大家見諒，就算是拋磚引玉，請大家不吝賜教。此外，感謝法學專家，中研院自由軟體鑄造場林誠夏主任，解答了不少笨牛在自由授權及引用有版權創作上的問題。

爲了使用這些教育軟體，我需要換作業系統嗎？

-->大可不必！

有位前輩說的好，自由軟體不只是作業系統而已，幹嘛要人家全套都換掉，使用者只要被一種開原碼軟體所感動，那就夠了。

笨牛也從早期的激進派轉變成實用派，所以這裡介紹的軟體多數是線上使用（就不用擔心作業系統），或是跨平台，也就是支援多種作業系統。慢慢的讓使用者在Windows上也能感受到這些軟體與教材的便利。所以若朋友們有使用上的問題，即是在Windows或是蘋果電腦，都歡迎來信討論。

有關作者笨牛

本名江易原（I-Yuan Chiang, nicknamed One Dollar），還沒想通道理算是笨，卻又有頑強不區的牛脾氣，所以叫笨牛。曾在Geneva分校區住了一陣子，又叫日內瓦一條牛（Geneva中文與瑞士知名城市同名，位於美國紐約州，人口約一萬人的小鎮）。

學經歷

1994/09-1998/06：台灣大學農業化學系農製組；1998/08-2000/04：服兵役；2000/09-2002/06：台灣大學農業化學所生工組；2002/04：考取教育部公費留學獎學金；2002/08-2003/07：台灣大學化學系有機化學助教；2003/08-2007/09：康乃爾大學食品科學系；2008至今：博士後研究，中研院環變中心。

笨牛幹過的傻事

2007/04：把租畢業袍的錢省下，捐給自由軟體基金會；2007/08/31：第一次到波士頓，第一站就去拜訪自由軟體基金會；2007/09/01：到MIT，這個全校公用電腦都是用Linux的知名學府（何時台灣的大學可以出現使用Linux/BSD公用電腦的大學？某些中小學早有了！）；2007/09：完成博士論文，使用GNU Free Document

License 的自由授權，同時寄了一本給自由軟體基金會。

笨牛的未來中短期的目標，除了追隨前輩繼續學習及推廣自由精神外，笨牛還想做些事情。

成立右左平權基金會：過去的數百年至今，人類在政治參與，兩性，種族，勞工等的平等權已經有明顯的覺醒及進步，現在一些議題才逐漸受重視。笨牛希望成立右左平權基金會，藉此喚起民眾對先天慣用左手或是後天想要學用左手的人該有的尊重，包括在言語上及物品設計上都可以考量到這不到 20% 的人口。無論您是慣用右手還是左手，都可以加入我們。附註說明，大家習慣說左右，雖然左字在前，卻沒有受到實際上的尊重，所以才取為右左平權，希望這次把右放在前，可以改善。

成立怪胎保育基金會：大家在教科書中或是媒體中學到牛頓，貝多芬，愛迪生，愛因斯坦等人是如何的聰明，如何做出劃時代的貢獻。很可惜的是這些教科書只講半套，從不告訴大家，這些天才在成名前是如何被同儕排擠，因為功課暴爛又不合群，就被老師覺得是傻蛋且被噙終生一事無成。等他們成名後，眾人只會因為他們是名人而遷就他們的脾氣，並無法真正接受或欣賞其人格特質。等他們死後，後代的平庸教育者及傳媒只挑他們想要的來說，就這樣又進入下一個輪迴。現在，笨牛計劃在先台灣成立怪胎保育基金會並在高中及大學成立相關社團（再逐漸推廣到其他國家）。不過原則上我們不鼓勵怪胎加入，因為怪胎不認為自己是怪胎（就像要保育台灣黑熊，並不會邀請黑熊加入，而是邀請人加入）。我們採檢舉制，喔不，是通報制，若您有認識怪胎，歡迎向我們通報，我們將會暗中保護他們，讓怪胎們有機會跟全世界的人分享上帝給的禮物。

執行 The project of Self-Confidence from Manhattan (蠻哈恩自信心計劃)：大家都知道二次大戰中毀譽參半的曼哈頓計劃是人類史上重要的大事。在此笨牛想要進行蠻哈恩自信心計劃，希望可以在提升台灣人的自信心上寫下正多於負的一頁。目前規劃是在紐約市曼哈頓區或是其他區收集可以正常說話且母語是英文的流浪漢或是乞丐，總共 100 名，提供機票食宿帶他們來台灣街頭暫住，證明他們講英文比多數大學的校長來的道地，應該讓他們來當大學校長才對。順便提醒家長，老師，教授，媒體，廣告業者，不要正在打壓台灣學生的自信卻不自知。附註說明，根據美國腔，應該翻譯成曼哈『恩』，因為美式英文中，非重音的 t 會被省略，例如台灣的英文老師或是美語雜誌會教 mountain 發音是毛恩，而不是毛騰，latin 的發音是雷恩不是拉丁。既然要學美國腔，就學道地一點，所以笨牛才取做蠻哈恩自信心計劃。有一次，笨牛遇到社區英文課程的講師，笨牛就帶著諷刺的語氣說，我預測，你們五十年後那一代美國人拼 Manhattan 字時，會漏掉 t，因為你們都不發那個音。還有，中文翻譯的重音也是造成台灣人學習英文的困擾，例如知名巴爾地摩 (Baltimore)，地在中文是四聲，是重音，容易誤導初學者，若翻成巴德默爾比較接近美國腔。一樣，Manhattan 重音在 ha，但是對應的音沒有四聲，所以只能把第一個音節改成非重音的蠻，比較接近我們聽到的樣子。

任何建議,問題,軟體分享,邀請演講等,歡迎來信:

電子信箱: iychiang1809 在 gmail 點 com

特殊著作權聲明

抱歉，著作權並不特殊，用特殊二字是為了吸引您的注意力。

本文件除所引用之圖片，文章，表格等有其著作人原始之授權種類與時效，笨牛可能無權變更外，其餘皆為笨牛之著作，所用之授權如下方說明。笨牛也會把引用的資料標示來源，為了讓使用者有最大的方便，笨牛將引用 public domain 及自由授權的資料為主。一般著作權的消滅要等到作者或是著作權擁有人過世後五十年才消滅而變成公共財。笨牛的文件不是什麼舉世聞名的巨作，更不是有直接商業利益的作品（不然出版社早就來找我），何不用自由授權，讓需要的人可以自由應用，分享（對不需要的人並無差別）。

本文件釋出的第一年（到 2010-05）採用自由授權（BSD 及 Creative Commons -Attribution 雙授權）。這兩種自由授權的特色是任何人可以自由的對本文件進行複製，修改，轉寄，散佈，從事商業行為等（包括部份文件或是文件全部，可以直接或是間接販賣），且不需要事先取得作者的同意，商業所得不需要與原作者分享。唯一的限制是您必須聲明本文件或所用到文件的部份是由日內瓦一條牛所製作。本文件釋出的第二年及以後（2010-05 以後），進入 Public domain。

為何要這麼說？因為根據台灣著作權法（一個台灣毫無選擇被迫跟著美國走的法律），任何創作完成公開後，即使作者沒有聲明著作權，該創作仍受到著作權法保護。就是這麼一個好法律，當創作人想要無償分享其創作物時，逼迫創作人一定要聲明使用自由授權或是聲明放棄著作權，才能讓其他人放心使用，不用擔心會有被告的風險（說白一點，就是擔心挖洞讓人家跳的問題）。請記得，美國法律不代表全體美國民眾的想法，例如自由精神之父 Richard Stallman，也是自由軟體基金會的精神領袖，倡導的自由精神及自由授權，強調使用者的自由，這點與著作權法強調保護創作人，打壓使用者，把使用者當賊的精神完全不同。有機會朋友們可以看看 Richard Stallman 的網頁 <http://www.stallman.org/>，會發現，這個擁有哈佛大學學士，MIT 博士班念到一半走人的大鬍子傢伙，原來是我們三民主義課本教到的先知先覺，是我們國文課本教到的先天下之憂而憂，也是風聲雨聲讀書聲，聲聲入耳，家事國事天下事，事事關心所敘述的人物。各位不用擔心，我們台灣也有這種人，而且很多。先不談政治人物這類敏感的議題，至少就笨牛知道，在社會服務及社會運動上，柴松林教授正是先知先覺（也是笨牛的思想啟蒙導師，一個不曾見面談話的人，只因為笨牛 1998 年大學畢業後讀過他的一本書的一個章節的前幾頁，就影響到笨牛的思想至今。笨牛在 2008/05 寄了封信及博士論文紙本還有笨牛手冊第一版送給他，也是笨牛第一次與柴教授連絡）。在自由授權界的先知先覺就很多，其中一定要認識的是洪朝貴教授，至於這老傢伙是怎樣的一個人，請讀者自行上網查詢，就當作是不用交也不用打分數的回家作業。

回題，若本文件沒有價值，那著作權法有沒有保護本文件就不重要了。若是本文件極具參考價值（包括可以用金錢計算與不能用金錢計算的價值），那是否讓使用者可以自由散佈，好東西跟好朋友分享，才能讓更多人享受其價值，那笨牛又何苦挖洞讓人家跳？這就是笨牛第一年採自由授權，而後放棄著作權的原因。其實笨牛也有很重的經濟壓力，但是生財有道，而且入股一點說，求名當求萬世名，計利當計天下利。現實一點說，這世界上聰明人太多了，所以需要笨牛之類的蠢蛋來幹點傻事。但是自由不是免費，而笨牛文件是免費的（指金錢），同時不是免費的（指非金錢），感謝您耐心閱讀這麼小的文字，這點您慢慢會了解。

免責聲明

1. 本文件採自由授權而且可以免費取得，可以自由修改，但是使用本文件不提供任何保證。同時笨牛所翻譯的字詞，包括單獨翻譯及共同翻譯，也不保證翻譯之正確性，若有錯誤，敬請指正。
2. 編寫的過程中，笨牛會盡力確保資料的正確性，但是難免有誤，敬請見諒。此外每個軟體的功能都是笨牛

去摸索 過才寫出來的，因此可能漏到許多功能，導致無法把軟體完整的介紹給大家，這就原諒笨牛吧！此外，文件的編輯非常匆促，錯字一定很多，若使用者發現錯字或誤用，請告訴笨牛，或自行改正。

3. 本文件釋出時同時以兩種檔案格式，一是 PDF 檔，只能看不能修改，這是方便新朋友們看看文件內容；其二是可以看也可以修改的開放格式檔 (ODF, open document format)，如文件檔 odt，簡報檔 odp，圖形檔 odg，試算表 ods。目前可以讀寫開放格式檔的軟體有十多種，多數是可以免費取得且自由散佈的自由軟體，朋友們可以自行選用，如不熟悉，笨牛會推薦支援多種作業系統且可以免費取得的 OpenOffice.org。

4. 本文件所提到部份跨平台軟體或是線上教材，理想上可以在其他作業系統操作，但是笨牛多數的時間是用 Linux 系統，若朋友在其他作業系統使用上有問題，歡迎來信討論。

5. 若需要將本講義從事商業行為，請注意，務必把受傳統著作權保護的圖片移除，以本次手冊來說，請把有關原子分子軌域的教學移除，雖然笨牛已經取得作者的同意可以使用及散佈軌域教學的螢幕擷取圖（文字沒關係，那是笨牛個人的作品），但是不代表使用者也取得相同的授權可以散佈，為了避免事後的紛爭，建議朋友們一定先移除那些圖片再來進行商業用途。而笨牛的文件與自由軟體的螢幕擷取圖都是自由授權，不限商業用途，所以不需要事先告知。----- 這就是自由授權與傳統授權的不同，漸漸的，您會感受到。

.

有關本文件之設定：

編寫本文件是使用自由且免費的作業系統 Ubuntu Linux 8.10 版，自由且免費的辦公室軟體 OpenOffice.org 3.0 版。

頁面設定為 A4，邊距設定為 2 cm。

一般內文設定：英文字形，Times，12 字形；中文字形，AR PL Ukai TW，12 字形。

Headling1 設定：英文字形，Times，bold，143% (20 字形)；中文字形，AR PL Ukai TW，bold，143%。

Headling4 設定：英文字形，Times，bold，16 字形；中文字形，AR PL Ukai TW，bold，16 字形。

英文知標點符號以英文規則為準，中文標點符號大致也是英文規則為主，因為有實作上的困難，這點敬請見諒。

若您無法正常閱讀或列印，不妨變換字形。

有關 Tryneeds/Wekey 團隊

Tryneeds 網頁: <http://tryneeds.westart.tw/tryneeds/>

註冊後可以進行翻譯

簡單的說, Tryneeds 把複雜的翻譯工作放到網路上, 把技術問題預先克服掉了, 翻譯者不需要知道 Big5 或是 UTF-8 中文編碼, 不需要知道 pot, po 檔, mo, qm 檔有何不同, 只要有專業背景熱情就可以協助翻譯, 技術面交給專家處理 (本來就是他們要處理)。

有興趣的朋友們歡迎加入我們, 協助我們, 讓大家都有中文文化的軟體可以用。



所屬專案	檔案名稱	翻譯狀態	總筆數	已翻譯	未翻譯	模糊翻譯	未確認	專案第一負責人	貢獻者
化學	avogadro.pot	89.1%	982	875	2	101	4	江易原	連結
文獻管理	bibus.pot	100%	553	553	0	0	0	江易原	連結
化學	BKChem BKChem.pot	83.86%	477	400	58	0	19	江易原	連結
化學	gchemutils.pot	55.62%	1086	604	347	0	135	江易原	連結
	gnuedu.pot	89.36%	423	378	23	0	22		連結
數學	wxMaxima.pot	99.54%	650	647	2	0	1		連結
幼教	childsplay_sp_latest.pot	0%	212	0	177	0	35		連結
數學	kig.pot	100%	1113	1113	0	0	0		連結
數學	kfile_kig.pot	100%	11	11	0	0	0		連結
數學	kmPlot.pot	100%	464	464	0	0	0		連結
數學	kbruch.pot	100%	183	183	0	0	0		連結
化學	kalzium.pot	100%	887	887	0	0	0		連結

Wekey 網站: <http://wekey.westart.tw>

而 wekey 正是軟體介紹的地方，任何使用者都可以分享他們的使用經驗。而笨牛比較有興趣的是教育類軟體，經常在網路上找到不錯的軟體，就寫在 Wekey，這樣大家都可以分享彼此的經驗，而且笨牛把幾個介紹的軟體或教材，都會放上『Wekey』說明，就是我們自己把相關資訊介紹出來，或是知道網路上有不錯的相關軟體使用文章，只要協助貼一個連結就好有興趣的朋友歡迎註冊後協助 Wekey 的編輯。



教育部 Ezgo 光碟則是每半年或是一年會發行一次的教育光碟，會收錄作業系統，常見的軟體，從幼稚園到研究所的軟體與教材，公家考試考古題（升學考，高考，技師考，研究所入學考，公費留考等考古題），當然也有自由軟體使用的手冊例如笨牛手冊。因為收錄的東西都是自由授權，所以拿到的朋友們可以自由複製一百份，一萬份分送給朋友，都是合法的。有興趣的朋友請上網找 Ezgo 光碟。

第 1 章 Chemical Structures in SourceForge.net--有機 化合物資料庫

戲法人人會變，各有巧妙不同。同樣的，分子人人會畫，各有授權不同。在此笨牛會針對採自由授權的分子資料庫加以介紹，其餘受傳統著作權保護的笨牛就沒興趣了，因為畫的再棒，不能自由散佈，若介紹給朋友們，萬一朋友們很喜歡，又轉寄給其他朋友，這樣不知不覺觸犯了著作權法（世界各國都一樣），不但失去分享化學分子圖的美意，還可能讓朋友們有被告的風險。這就是為何笨牛堅持要尋找自由授權的資源。若是真有很棒的非自由授權資料，那笨牛頂多貼個連結。還有，資料庫很多，笨牛還在慢慢摸索，這裡介紹的只是笨牛測試過的，不見得是最完整，請給笨牛一些時間找尋更多有用的資訊。

1-1 有關 Chemical structures

授權：BSD 自由授權

作者：Jerome Pansanel（法國人）

費用：免費

支援的作業系統：線上使用，任何作業系統皆可。但是需要安裝 JAVA 才能看立體分子。目前是 2.1 版（2008-01-03）

中文介面：有，由笨牛及所屬的 Tryneeds 台灣中文化團隊規劃及翻譯。

安裝方式：可上網瀏覽或是下載後用化學看圖軟體瀏覽。

官方網頁：<http://chem-file.sourceforge.net/>（英文）

適合對象：高中生，中學老師，大學生，研究生及大學教職員等

Wekey 說明：http://wekey.westart.tw/Chemical_Structures_in_Sourceforge
說明：

以前讀小學時常聽到，班上有人遲到一分鐘，就是浪費全班五十個人總共五十分鐘，當然這是很負面的話。若把這句話轉用在正面上，如果有件事情可以幫大家節省一分鐘，幫一百個人就節省一百分鐘，一百萬人就是一百萬分鐘。

笨牛在此大聲的說，這個法國人寫的化學分子資料庫正是如此，幫大家節省大量的時間。高中老師及大學教授不用額外花時間準備這部份的課程，只要上網，當然事先下載好不上網也行，還有，只要拿了教育部的 Ezgo 光碟或是其他的有收錄這個資料的 Linux 版本，連上網也可以免了（但是要有電腦吧！）。使用蘋果作業系統或是微軟系統的人也不用擔心，因為這資料庫可以線上使用，不需要特定的作業系統。這 Chemical Structures 不但可

以用來認識有機化學的分類，也有基本熔沸點的資料，而在網頁上呈現分子的立體結構，更是這資料庫的特色（詳見本章節的介紹）。此外，網頁還提供 InChI 及 SMILES 文字化學可以讓其他的程式讀取化學式的，例如平面化學繪圖自由軟體 BKchem（也是笨牛翻譯的），只要複製化學資料庫上的 SMILES 化學式，貼在 BKchem，就可以看到該化學式，不必重新畫。當然所附的 CML 化學檔也可以用其他的看圖程式開啓（例如 BKchem, Avogadro, Gchem3d-viewer 等），不限定在網頁或是 Jmol 才能看。

因為笨牛看到了這資料庫的方便性，所以我們 Tryneeds 團隊把資料庫中文化（也是第一個翻譯的亞洲語言），希望的是讓更多人可以使用，不會因為語文的隔閡而無法接觸這麼棒的教材，尤其是剛接觸化學的高中生，正在啓蒙階段，更需要這種教材。在笨牛連絡原作者且取得翻譯許可後，我們就進行翻譯。主要是由笨牛及中研院環變中心的同事黃淑惠小姐及 K 先生（KC1 先生，他不願意具名，我們尊重他）進行翻譯。過程中，感謝笨牛以前的長官，台大化學系劉緒宗教授及蔡蘊明教授給予寶貴的建議。還有，笨牛回想到剛進大學時背化學單字的痛苦，就決定保留英文，加上中文的雙語並行法，希望可以協助大學生熟悉這方面的單字，不需要英文的讀者，可以看中文。此外，若有教授需要純英文介面，也可以選英文，而且目前還有法文，德文，西班牙文，荷蘭文可以選。（說明：笨牛在 2009 年 1 月把化合物的翻譯交給原作者，但是原作者很忙，沒有時間更新）

說了這麼多優點，這些並不是笨牛推薦及進行翻譯的主因。真正的因素是，**該作者採 BSD 自由授權，同時可以免費取得**。因為是自由授權，所以喜歡就可以寄給一百個朋友（完全合法）。

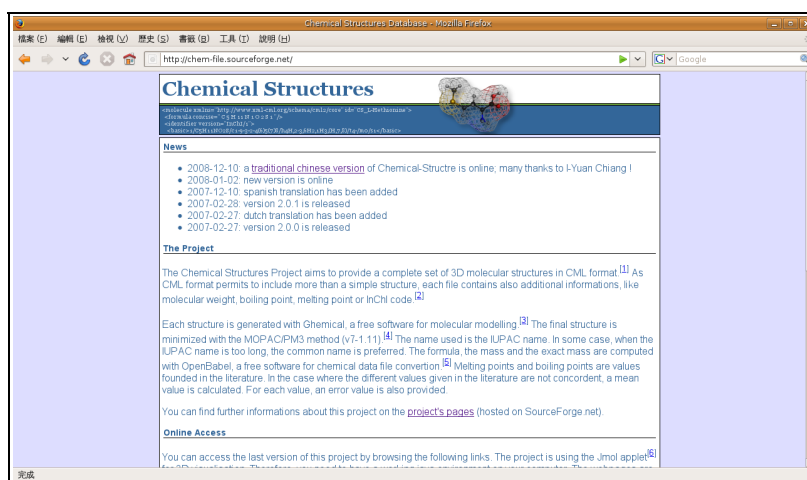
因為是自由授權，所以可以公開使用（包括學校的教學，公司員工訓練，不需要考慮買公播版的問題）。因為採用 BSD 授權，所以可以進行商業用途（例如寫書賣錢，寫網頁營利，補習班 教學等），不需要事先向作者取得同意。

此外，作者接受分子的訂作，只要告訴他平面式，他會把立體式畫出來，加到資料庫。之前笨牛向作者提交翻譯檔的同時也建議了一些含氮及含硫的無機分子，及一些電視食品廣告常出現的不飽和脂肪酸或是反式脂肪酸，作者表示接受且會在新版釋出。看到這一段，不曉得各位朋友有何想法？我們可以向作者建議我們自己教學上需要的分子，如果您是生化學教授，您會建議什麼分子？如果您是環工系化學類的教授，您會建議什麼化合物？有沒有想過，需要的分子圖，只要出一張嘴，寫個 email，原作者就會畫好，而且有 Tryneeds 台灣中文化團隊進行中文化，自己根本不用動手（也不用去學化學軟體的操作），而且作者畫的東西，我們可以拿來進行教學及商業用途，天底下去哪裏找不勞而獲的好東西！

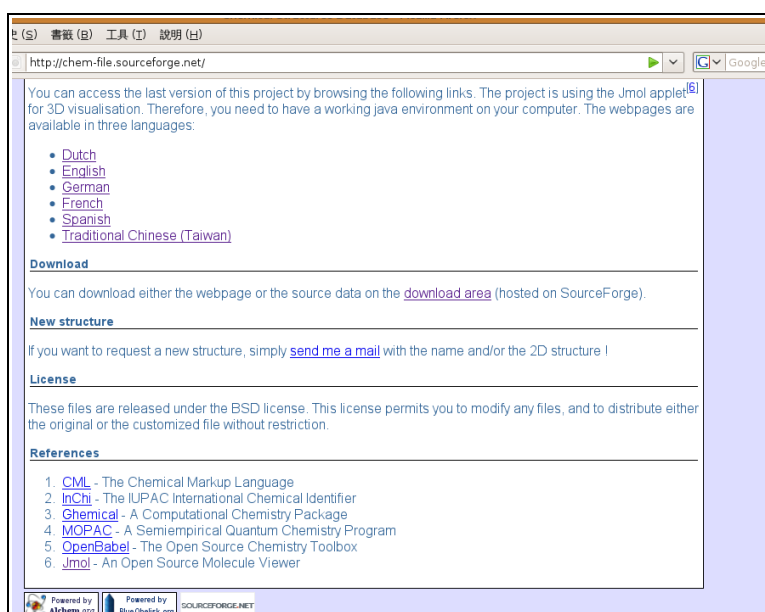
當然，化學資料庫的作者不是傻蛋，我們中文化團隊也不是傻蛋，我們醒過來後，才發現受到自由精神這麼多好處，現在只是進自己的能力去回報前人的努力。OK，就此打住，現在來看看該如何用這資料庫。

1-2 Chemical Structures 首頁及線上分子展示

網址是: <http://chem-file.sourceforge.net/>



不好意思，上面那個中文版翻譯者的名字 I-Yuan Chiang 正是小弟我。



網頁往下走，可以看到目前有六種語言介面可以選。

Download: 提供下載的連結。

New structure: 若有需要建議的分子，可以 email 給作者。

License: 授權宣告，作者是用 BSD 自由授權 ([中文介紹 1](#), [中文介紹 2](#))

References: 其中 Ghemical 是作者用來畫分子立體圖的軟體。

點入 [Traditional Chinese \(Taiwan\)](#)，會看到這個分類畫面。作者把化合物分成 31 類，當然這分類只是方便使用者找尋，未必是有機化學教科書偏好的分類。畫面右上角有 [Name index](#) (依化學名分類) 及 [Formula index](#) (依化學式分類)，則提供其他的分類，在此就不多說。

The screenshot shows a web browser window titled "Chemical Structures (化學構造) - Mozilla Firefox". The address bar shows the URL "http://chem-file.sourceforge.net/data/index_tw.html". The page header includes the title "Chemical Structures" and a molecular structure image. Below the header, there is a navigation bar with "Name index (依化學名排列)" and "Formula index (依化學式排列)". The main content area is titled "Directories (目錄)" and lists 31 categories of chemical compounds, each with a link to its respective page:

- Acid anhydrides (酸酐)
- Alcohols (醇類)
- Aldehydes (醛類)
- Alkanes (烷類)
- Alkenes (烯類)
- Alkynes (炔類)
- Amides (醯胺類)
- Amines (胺類)
- Amino acids (胺基酸)
- Aromatics (芳香族)
- Carbamides (碳基胺類)
- Carbohydrates (碳水化合物)
- Carboxylic acids (羧酸)

在此以 [Alcohol \(醇類\)](#) 為例子，點入後可以看到多種醇類化合物，我們就選熟悉的 [Ethanol \(酒精/乙醇\)](#) 來瞧一瞧（再次提醒，作者隨時會把我們對各個化合物的中文翻譯放到網頁，請耐心等待）

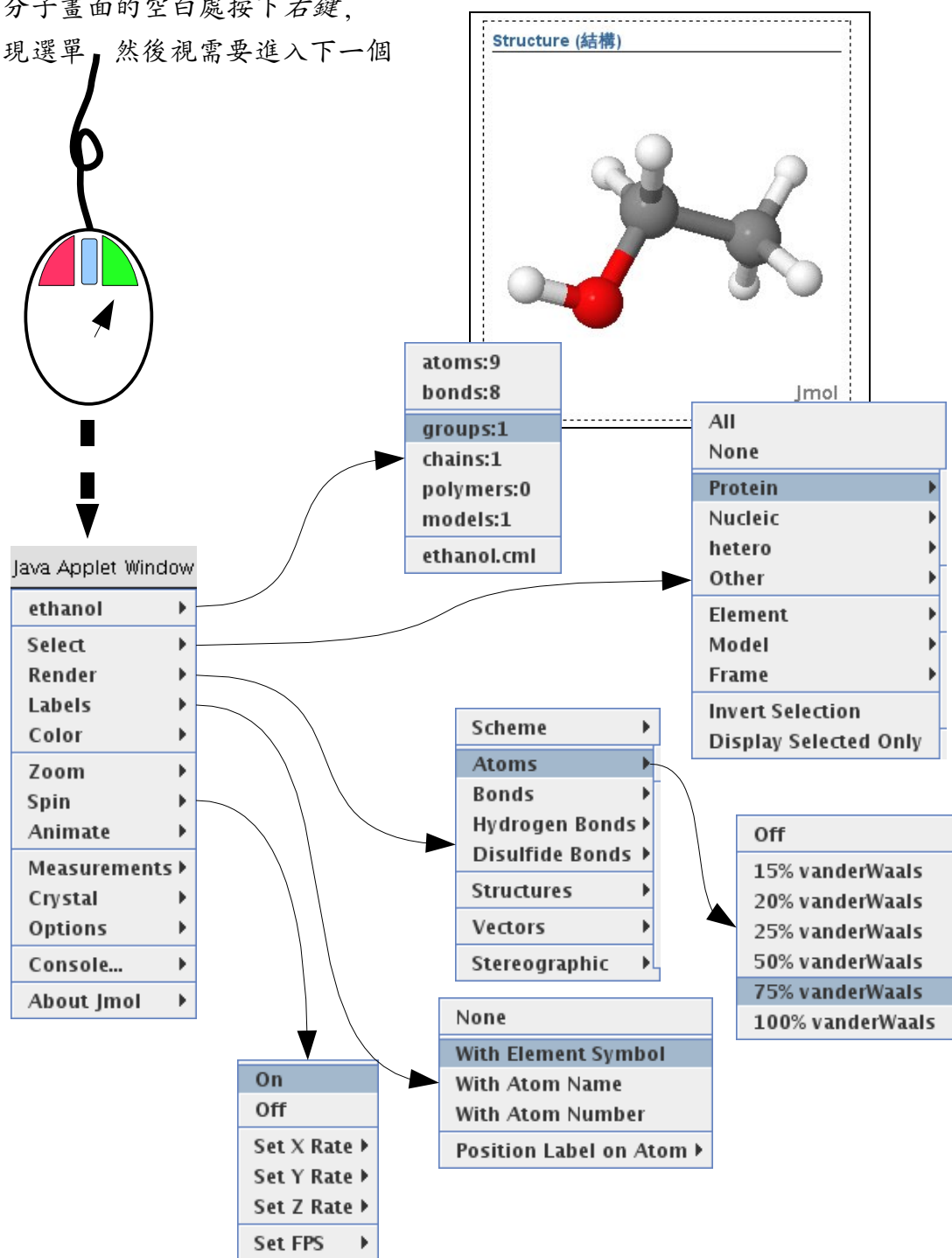
The screenshot shows the "Alcohol (醇類)" page on the "Chemical Structures" website. The page header is the same as the previous screenshot. Below the header, there is a navigation bar with "Previous (前一頁)" and "Name index (依化學名排列) | Formula index (依化學式排列)". The main content area is titled "Names (名稱)" and lists various alcohol compounds, each with a link to its respective page:

- 2-Methylpropan-1-ol (en)
- 2-Methylpropan-2-ol (en)
- (2R,3R,4R,5S)-Hexane-1,2,3,4,5,6-hexol (en)
- (2R)-Butan-2-ol (en)
- (2S)-Butan-2-ol (en)
- (2S)-Heptan-2-ol (en)
- (2S)-Hexan-2-ol (en)
- (2S)-Octan-2-ol (en)
- (2S)-Pentan-2-ol (en)
- (3S)-Heptan-3-ol (en)
- (3S)-Hexan-3-ol (en)
- (3S)-Octan-3-ol (en)
- (4R)-Octan-4-ol (en)
- Butan-1-ol (en)

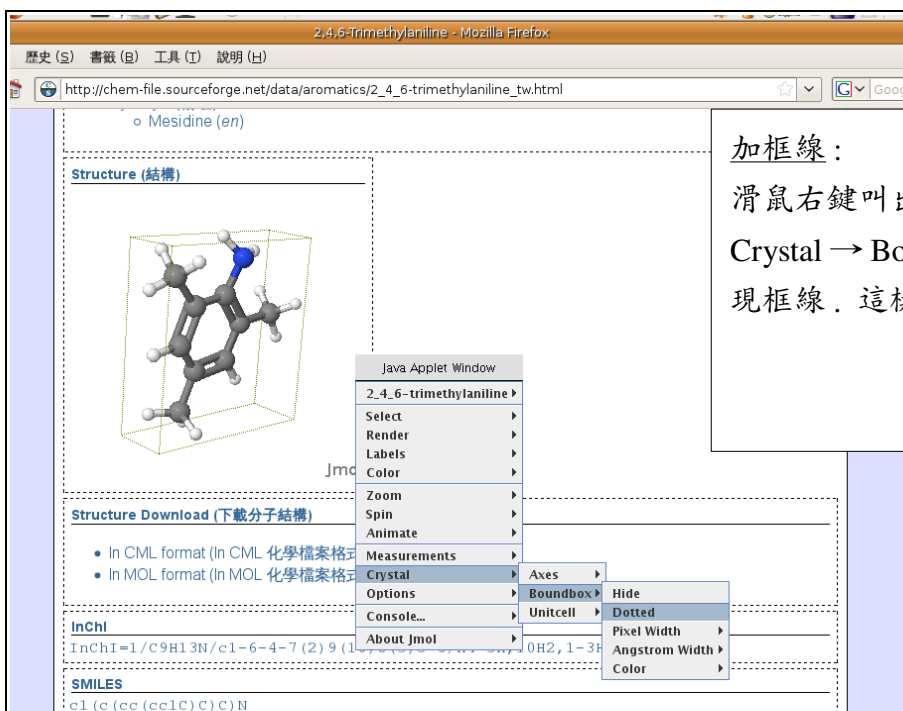
1-3 基本看圖功能

如果只有翻滾及放大縮小分子就太小看這個資料庫。其實 Chemical Structures 是利用 Jmol 的功能，可以有很多功能，至於 Jmol 在之後的章節會有簡介，在此就簡單的談談操作法，讓老師及學生們可以快速上手，至於更細節的操作，因為時間的關係，目前暫時不提，希望未來可以補齊這部份的說明

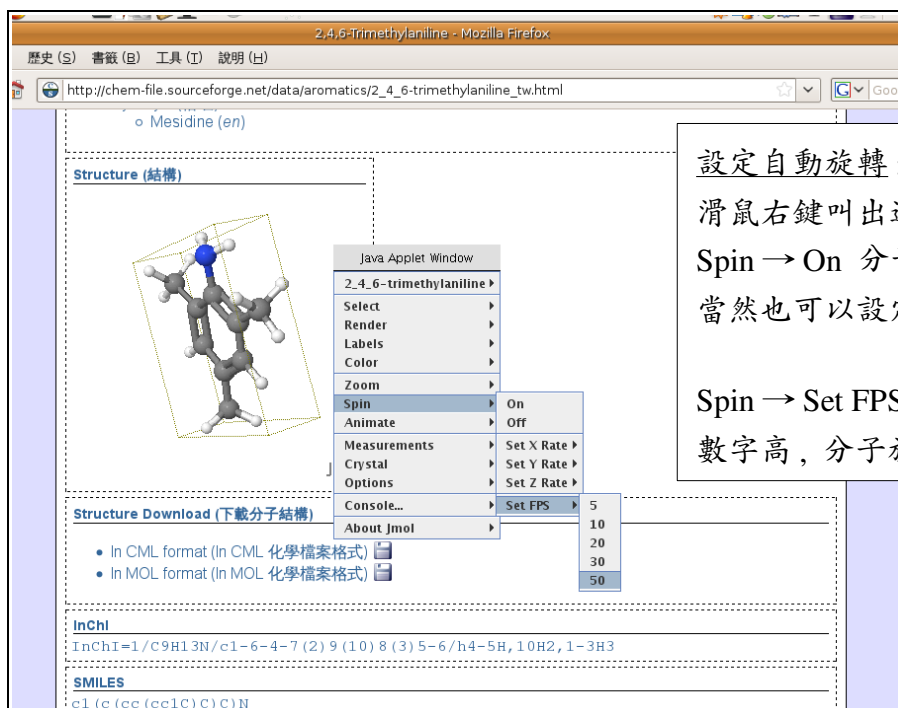
只要在分子畫面的空白處按下右鍵，
就會出現選單，然後視需要進入下一個
選單。



讓分子自動旋轉



加框線：
滑鼠右鍵叫出選單：
Crystal → BoundingBox → Dotted 會出現框線，這樣看起來更立體。

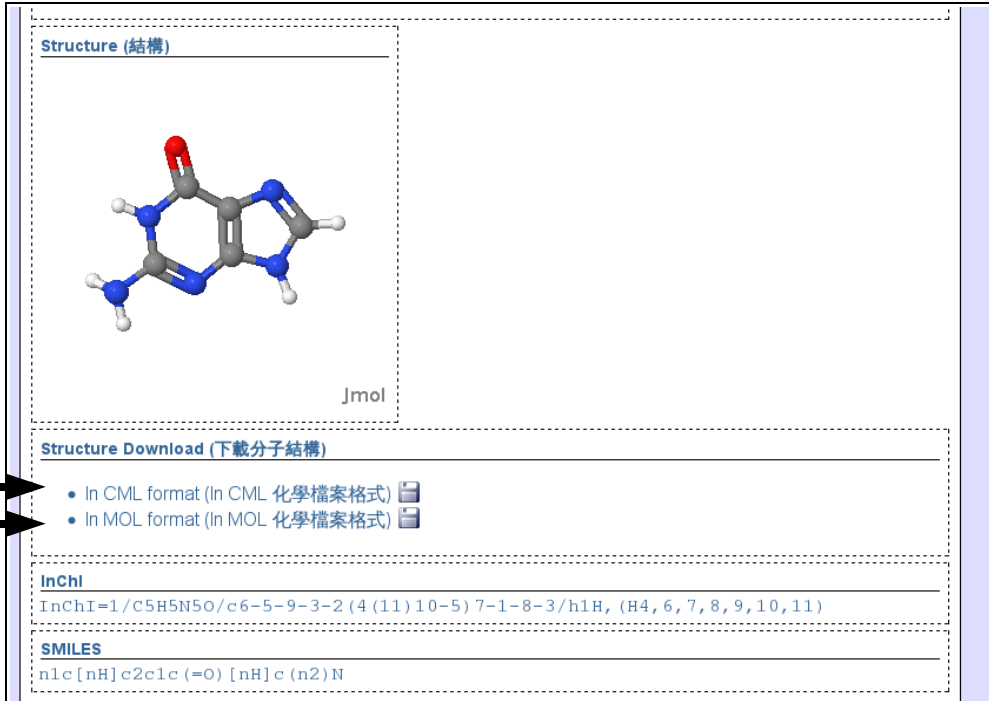


設定自動旋轉：
滑鼠右鍵叫出選單
Spin → On 分子開始旋轉
當然也可以設定特定的轉軸及轉速。
Spin → Set FPS 應該是每秒的格數，
數字高，分子旋轉的比較流暢。

如此一來可以讓學生們輕鬆見到分子的立體結構，老師們再也不用為立體結構說到口乾舌燥，而學生依然身陷五里霧中。

1-4 使用其他軟體讀取化學檔案

除了在網頁上使用 Chemical Structures，還有該分子的 CML 及 MOL 化學檔（目前正在研讀相關資料，希望未來可以介紹這些檔案），以及文字化學式。



Structure (結構)

Jmol

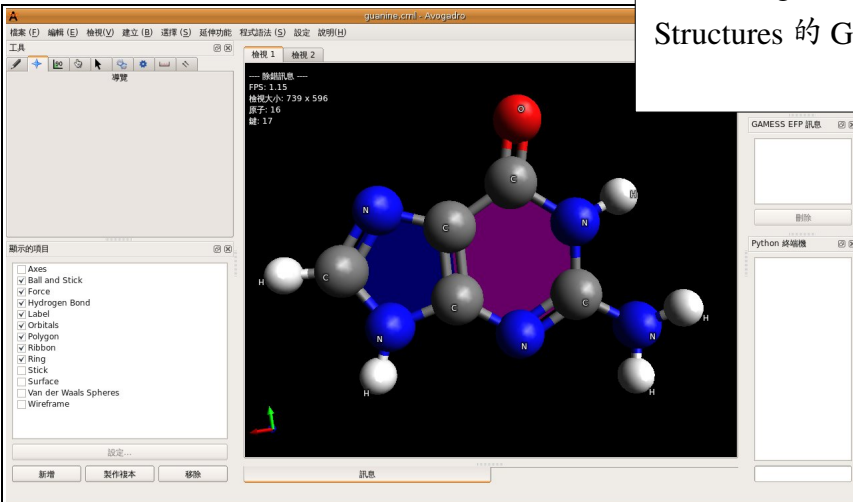
Structure Download (下載分子結構)

- In CML format (In CML 化學檔案格式)
- In MOL format (In MOL 化學檔案格式)

InChi
InChI=1/C5H5N5O/c6-5-9-3-2(4(11)10-5)7-1-8-3/h1H,(H4,6,7,8,9,10,11)

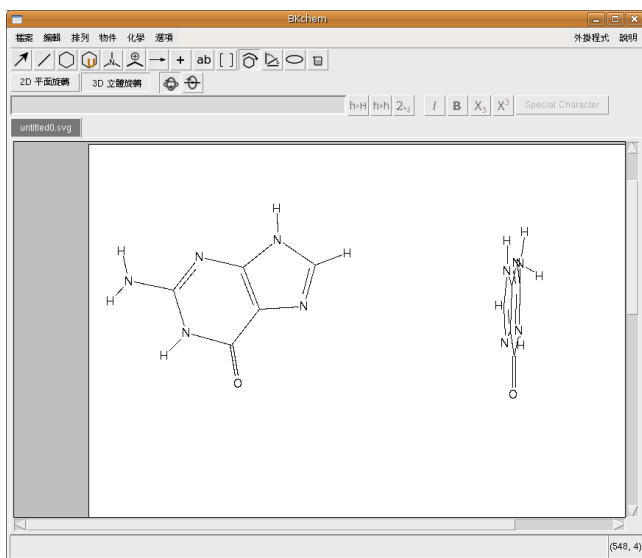
SMILES
n1c[nH]c2c1c(=O)[nH]c(n2)N

CML 是常見的化學檔案格式，有如 PDF 是常見的文件格式。在此下載 CML 化學式，可以使用其他的軟體讀取，例如本文件所介紹的立體分子繪圖看圖軟體 Avogadro，及 gchemutils 的子軟體 Gchem3d-viewer。



使用 Avogadro 觀看下載自 Chemical Structures 的 Guanine 之立體結構。

更奇特的是，平面化學繪圖軟體 BKchem 也可以在白底黑線的场景觀看立體結構，這很令笨牛吃驚，您一定試試看這功能。



使用 BKchem 匯入後觀看下載自 Chemical Structures 的 Guanine 之立體結構。其中右圖是複製後進行立體旋轉。

Bkchem, 支援多種作業系統的化學平面分子繪圖軟體，使用上請見笨牛手冊一。

1-5 下載及使用 Chemical Structures

下載處

http://sourceforge.net/project/showfiles.php?group_id=169897

在沒有網路的地方，使用者可以事先下載 Chemical Structures，這樣就不用擔心網路問題。

一般使用者請下載 zip 檔即可。

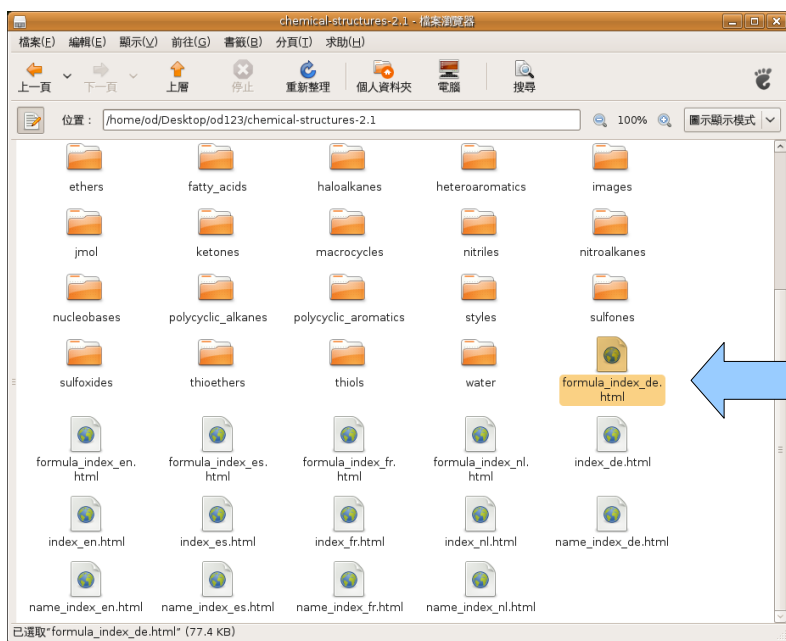
需要原始檔者請下載

source.tar.gz

Package	Release	Filename	Size	Architecture
Chemical Structures				
Latest	2.1	(2008-01-03 14:39)		
		chemical-structures-2.1-source.tar.gz	5747807	Platform-Independent
		chemical-structures-2.1.tar.gz	6609437	Platform-Independent
		chemical-structures-2.1.zip	10178367	Platform-Independent
		ChemStruct_FR_2.1.iso	43677696	Platform-Independent
Totals:	1	4	66213307	

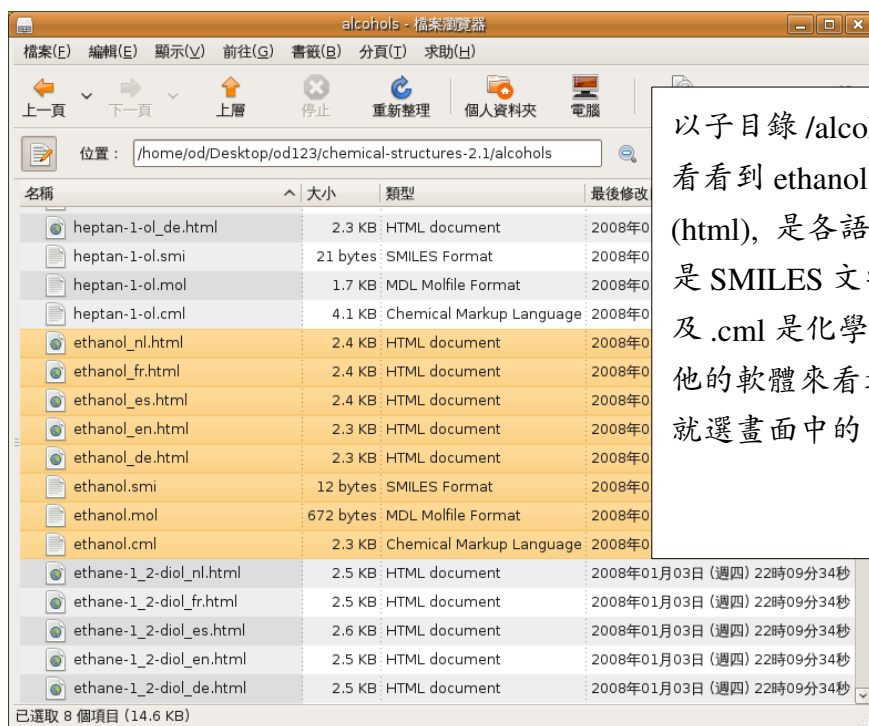
解壓縮後會看到多個子目錄，這是作者將化合物分類（目前是分為31類），而下方有一堆html檔，正是這資料庫的網頁檔，例如畫面中選取的是index_de.html用滑鼠雙擊後瀏覽器會跳出德文的使用介面，剩下的操作如同前面的敘述，也是透過瀏覽器的介面。

雖然原作者已經把我們的翻譯放到網路上，但是可以下載的部份似乎還沒有出現我們的翻譯，希望這個月（2009-05）作者可以放上去。



點入該後index.html後，會出現與網頁首頁相同的畫面，接下來的操作法與前述的方法相同，可以選擇自己喜歡的分類。

看個別化合物



1-6 在高中化學教學應用之建議

在解釋分子軌域的形狀時，可以利用 Chemical Structures 的範本，解釋 sp^3 ， sp^2 及 sp 鍵結時分子形狀的不同，當然這部份以化學立體分子繪圖軟體 Avogadro 的教學效果會更好（笨牛另有章節介紹 Avogadro）。

此外，解釋純碳氫如烷類，烯類，炔類及芳香族之間有何不同？相同碳數的醇類與醚類的化學是相同，但是性質上卻是完全不同的兩類，除了看平面化學式，化學老師們可以播放這兩類的化合物給學生們看，讓他們更能體會分類上的不同。

當然，老師們可以來點炫麗的技巧，例如前面敘述的幫分子加框線後讓分子自動旋轉，先引起學生的興趣，再來比較性質的不同，例如請學生比較在酸類中，碳的多寡與熔沸點之間是否有相關性，漸漸的使用歸納法讓學生了解有機化合物的性質，可能比舊時代單純先講結論的教學來的有用。而且若能從高中就讓學生接觸有機化合物的立體結構，對於日後想要就讀或是從事有機化學及生物化學的研究會有幫助，因為學生的腦海裏已經有分子的立體畫面，對於立體異構物，有機合成，酵素反應等的立體觀念很有幫助。

最後再次強調，這些是現成的教材，立體分子已經有法國人畫好了，中文翻譯也已經完成，使用的文件說明笨牛也在寫，而寫所有的東西是自由授權，化學老師們只要拿來用就好，而且可以自由散佈，可以進行商業用途。為何不試試看？或許有意想不到的收穫。

第 2 章 Crystal Lattice Structure 無機化物結晶圖

2-1 有關 Crystal lattice Structure

授權：Public domain (公共財)，授權聲明請見 cst-www.nrl.navy.mil/lattice/faq.html

作者：US Naval Research Laboratory (美國海軍研究室)

費用：免費

支援的作業系統：皆可

中文介面：無

安裝方式：線上瀏覽，也可下載分子 (XYZ 化學檔) 用化學看圖軟體瀏覽

官方網頁：<http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/> (英文)

官網的擷取畫面：擷取畫面 (英文)，線上說明 (英文)

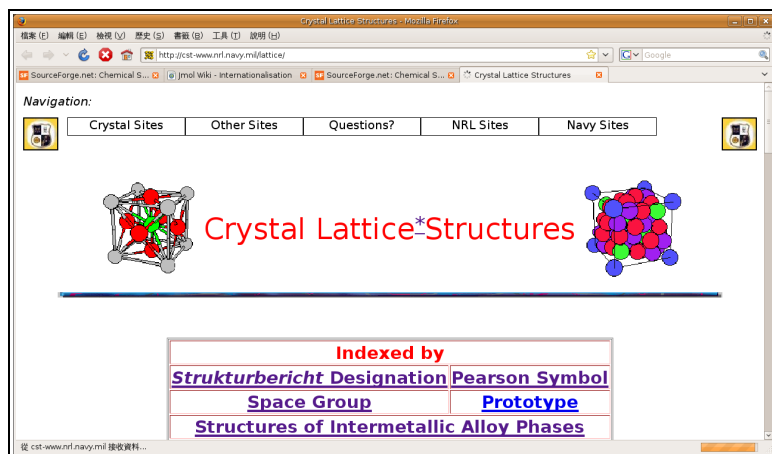
在 Wekey 的介紹：http://wekey.westart.tw/Crystal_Lattice_Structures
說明：

在開始之前，一定要告訴大家，笨牛對結晶學是個十足的大外行，可能無法詳細的相關知識，這點一定要原諒笨牛。對於基本的結晶圖形，笨牛找到這個網頁，內容相當豐富，而且是 Public domain，換句話說，作者放棄著作權，這創作可以任意使用，不受著作權法的保護或限制 (笨牛不會故意找個洞讓大家跳)。其實美國很多公家單位所釋放的資料都是 Public domain，例如 NIH, EPA, USGS 等，在台灣大家會用他們的資料，卻沒想過他們是使用何種授權，多數人也不會去注意什麼是 Public domain。

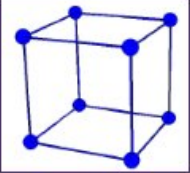
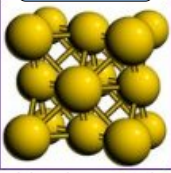
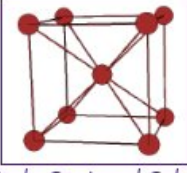
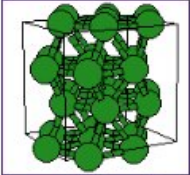
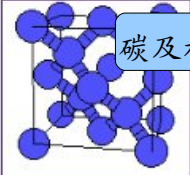
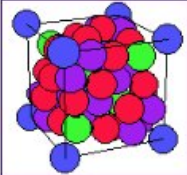
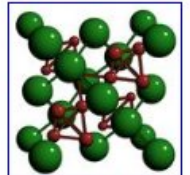
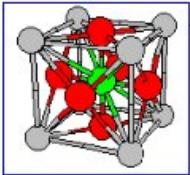
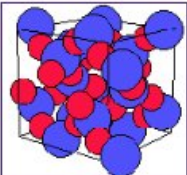
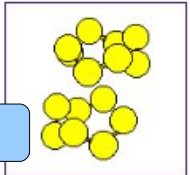
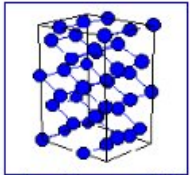
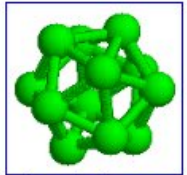
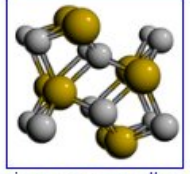
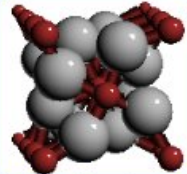
我們 Tryneeds 團隊正在考慮該如何把這網站的資料作更好的應用，例如翻譯成中文，收錄到下一版的 Ezgo (或許當您看到這一段時，我們已經完成翻譯及收錄的動作)。或者把整個網站抓下來，或者只挑高中課程有教到的部份進行翻譯及文件編寫。總之，我們還在頭疼中，真希望有化學背景的人願意出手相救，而不是讓笨牛這種外行人碰的鼻青臉腫，還做不好。

2-2 線上使用

進到首頁後會看到右方的畫面
“Crystal Lattice Structures”



網頁向下轉動，可以看到 14 種分類（進入分類後可以看到更多的實際例子），大多數是笨牛沒聽過的，好吧，那就挑有聽過的來介紹一下。

	立方最密	
簡單立方	 <p><i>Simple Cubic and related structures</i></p>	體心立方
	 <p><i>Cubic Close Packed and related structures</i></p>	
		 <p><i>Body Centered Cubic and related structures</i></p>
六方最密	碳及相關	
	 <p><i>Hexagonal Close Packed and related structures</i></p>	
	 <p><i>Carbon and Related Structures</i></p>	
		 <p><i>Manganese Structures</i></p>
	 <p><i>The Laves Phases</i></p>	
	 <p><i>Perovskite and Related Structures</i></p>	
		 <p><i>Quartz (SiO₂) and Related Structures</i></p>
硫		
	 <p><i>Sulfur and its Compounds</i></p>	
	 <p><i>Lanthanides, Actinides, and Compounds</i></p>	
		 <p><i>IIIb-VIb Elements and Compounds</i></p>
	 <p><i>Binary Pnma Alloys</i></p>	
		 <p><i>Other Structures</i></p>

其中可以用在高中化學的還有碳及硫的結構。

以分類中 Simple Cubic (簡單立方堆積) 為例, 可以看到數種例子, 我們就選最熟悉的, 也是最常上教科書的 NaCl 來瞧一瞧. 當然除了氯化鈉, 還有許多簡單立方堆積的化合物, 有興趣的朋友可以自行參考.

The screenshot shows a web browser window titled "Simple Cubic and Related Structures - Mozilla Firefox". The address bar contains "www.nrl.navy.mil/lattice/struk/sc.html". The main content area features the title "Simple Cubic and Related Structures" in red text, followed by a 3D wireframe model of a simple cubic unit cell. Below this, the text "d to the simple cubic lattice." is partially visible. A grid of nine crystal structure models is displayed, each with a label below it. A blue arrow points to the NaCl (B1) structure, which is highlighted with a red border. The structures shown are:

- Simple Cubic (A_1)
- β Po (A_1)
- α Hg (A_{10})
- NaCl (B1) - highlighted with a red border and a blue arrow pointing to it
- FeSi (B20)
- TlF (B24)
- (Three additional structures are shown in the bottom row but are not labeled)

氯化鈉: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/b1.html>

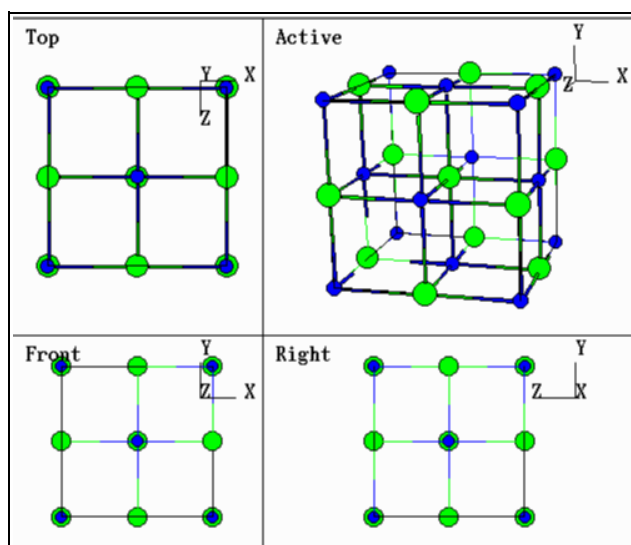
Crystal Lattice Structures:

The NaCl (B1) Structure

You can now

- [see the structure from several perspectives;](#)
- [examine the structure with an external viewer;](#) or
- [download the coordinates of the atoms in these pictures in XYZ format.](#)
- [visualize the structure \(Uses the JMOL Applet\)](#)

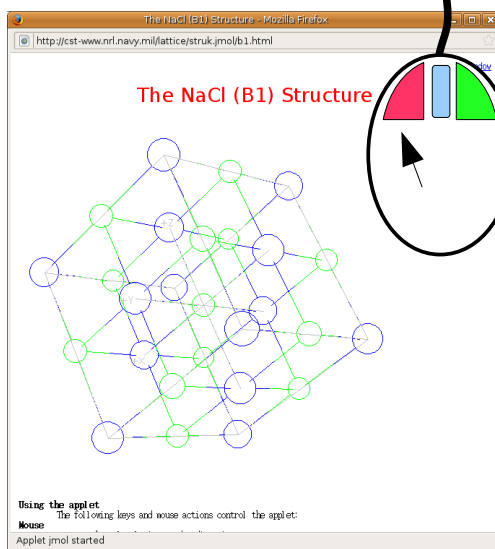
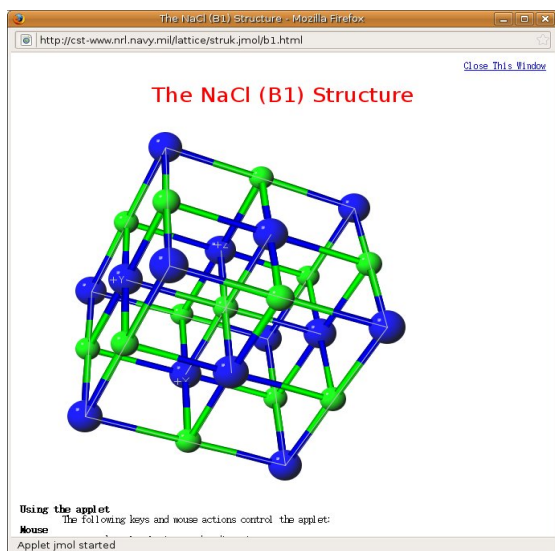
其中 [see the structure from several perspectives;](#) 可以看到圖片如下，對於不需要立體圖片，只需要照片的人，可以下載這個就好，圖片格式是 png，就當作是開放格式的 JPEG 檔就好，因為 png 是開放格式圖形及照片檔，所以目前多數自由軟體都是設定用這個格式，例如要寫本文件，笨牛所用的螢幕擷取程式 Ksnopshot，雖然支援多種格式，但是預設的就是 png 檔。



You can now

- [see the structure from several perspectives](#);
- [examine the structure with an external viewer](#); or
- [download the coordinates of the atoms in these pictures](#) in [XYZ](#) format.
- **visualize the structure** (Uses the [JMOL Applet](#))

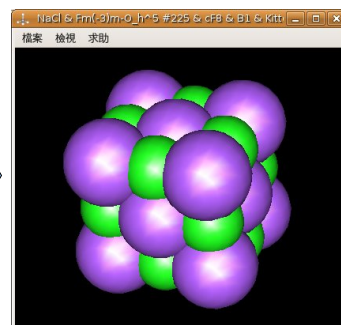
點入 visualize the structure, 則會跳出一個小視窗, 正是晶體的立體模型, 使用滑鼠左鍵拖曳可以選轉分子, 右鍵出現功能選單可以進行多項調整, 在此先省略, 他日再補齊。



You can now

- [see the structure from several perspectives](#);
- [examine the structure with an external viewer](#); or
- [download the coordinates of the atoms in these pictures](#) in [XYZ](#) format.
- [visualize the structure](#) (Uses the [JMOL Applet](#))

點入 examine the structure, 則會出現儲存檔案的視窗, 此時可以存檔, 使用其他軟體開啓, 或是由畫面中預設的 Molecules Viewer (指令是 gchem3d-viewer, 我們有進行中文化, 後面會介紹). 就會跳出右方的視窗, 顯示其立體結構. 但是有個地方笨牛還無法搞定, 就是所下載 xyz 結晶檔在其他軟體觀看時, 無法顯示上圖那樣, 陰陽離子間有鍵結, 例如上圖中正中央的綠色球代表氯離子, 上下前後左右都有一支鍵與週邊的藍色鈉離子相接. 當然離子鍵不能用共價鍵的型式去畫, 但是這種六支鍵的型式更容易體會到離子晶體陰陽離子在空間中的相對關係.



2-3 如何將圖形輸出,用在文件,簡報,或網頁

*若是只需要平面圖,請使用上述的聯結 (see the structure from several perspectives) 直接下載圖。

*如果需要立體圖的截圖,最快的方法是使用螢幕擷取程式,缺點是解析度可能欠佳而不適合列印。但是做簡報或是用在網頁應該夠了。

*如果需要較高解析度的圖片,可以把 xyz 檔案存檔後由其他軟體讀取,旋轉到適當的角度後匯出成高畫質的圖片。可以擔任此功能的軟體有很多,包括 pymol, Jmol, Gchemutils 的子程式,在此笨牛推薦的是跨平台的 Avogadro,在另外的單元有匯出高解析度方法的介紹。

2-4 其他可用在高中化學的晶體圖

體心立方的 CsCl: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/b2.html>

立方最密的 In: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/a6.html>

六方最密的 La: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/a3p.html>

石墨: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/a9.html>

鑽石: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/a4.html>

硫 (S_8): <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/a16.html>

各種石英的結構: <http://cst-www.nrl.navy.mil/lattice/struk/sio2.html>

關於晶體的結構網路上還有不少資源,只是目前笨牛找到的這個是最齊全的。但是很多內容大學及研究所的化學課程,在高中老師的使用上就必須先花時間挑選適當的題材,若有問題,歡迎來討論。

第 3 章 PhET 互動式教學軟體

3-1 有關 PhET

授權：自由授權，請見 <http://phet.colorado.edu/about/licensing.php>

費用：免費

支援的作業系統：多種作業系統（線上使用或下載使用都可）

中文介面：網頁是英文，但教學主題已經取得原作者的翻譯許可，Tryneeds 團隊進行中。

安裝方式：線上使用或是下載使用

官方網頁：<http://phet.colorado.edu/index.php> (英文)

適合對象：國中生，高中生，中學老師，大學生，研究生及大學教職員等

說明：

若要取得原始碼，請見這網頁的說明 <http://phet.colorado.edu/about/source-code.php>

官網提到，可行的教學，授權是 CC-attribution（創用 CC 授權，標示作者，簡單的說，可以分享，再製，可以商業用途）。但是原始碼的部份則是 GPL 授權（標示作者，公佈原始碼，可以做商業用途）。更詳細的授權內容請朋友們上網找，這裏只是簡單介紹。其實之前笨牛在看授權時，網頁說教學不得做商業用途，而且原始碼也沒有放到網路上，但是現在來看，似乎有所變動。

PhET 是很棒的互動式教學軟體（叫教學軟體可能不適合，正確的是 simulations，但是意思到就好，這樣一般使用者容易了解）。原本 PhET 以物理互動式教學為主，後來可能是做出口碑，漸漸發展到多個領域，包括數學，生物，化學，地球科學等。笨牛很喜歡 PhET，因為把艱深的原理變簡單了，無論是中學老師還是大學教授，若能用 PhET 配合教學，一定可以提升學生的學習興趣。之前收到 PhET 的 email，他們說會儘快加入自動更新的機制，

也就是如果化學可逆反應的教學有了新版本，使用者會收到通知，按下同意後就自動更新（天阿！不但有合法免費的互動式科學教學可以用，還有自動更新，美國人怎麼這麼慷慨）。

最棒的是，網頁把該其他老師利用該教學的教案放上去，讓其他人可以觀摩學習（不過目前都是英文，其實我們可以自己來做中文教案，或許教育部或是國科會可以帶頭進行）



3-2 線上使用或下載安裝

PhET 可以在線上使用，也可以下載存在電腦中。下載的網頁：http://phet.colorado.edu/get_phet/full_install.php

PhET Offline Website Installer - Full Install

The full PhET Offline Website Installer package installs a copy of the PhET website onto your computer. Once installed, you do not need to be connected to the Internet to view or run any of the simulations (as long as you have **Java**, **Flash**, and a web browser such as **Firefox** or **Internet Explorer**).

Java is included in the Windows download. Mac OS X users already have Java preinstalled. Linux users are recommended to find a suitable version for their system.

These installers of the PhET simulations are updated frequently. We suggest uninstalling your earlier versions before installing a new one.

- **Download installer for Windows (includes Java) - 99 MB**
- **Download installer for Mac OS X - 87 MB**
- **Download installer for Linux - 83 MB**

這裡說，若選擇下載支援 Windows 系統的，已經包含 Java。而蘋果作業系統已經預先安裝了 Java。Linux 使用者請自行下載及安裝適當版本的 Java。Windows 或是 Mac 的使用者請點選適當的連結，點入後會進入先請使用者註冊一個帳號（非必要），若不想註冊帳號的，請點選“download the file directly”，開始下載。存檔後直接安裝或是解壓縮後安裝

Download File

Before downloading this file, please tell us a bit about yourself. Providing this information will help PhET retain the support of its financial sponsors.

Your email will not be shared with anyone.

Please login with your existing account information, or create a new account. If you do not wish to help PhET, you may skip the registration process and **download the file directly**.

Required fields are marked with an asterisk (*).

Login

email*
password*
Login
Forgot your password?

New Account

description* Teach
email*
password*
retype password*
name*
First and
organization*
Ne

開啓中: PhET-Installer_windows.exe

你已決定開啓

PhET-Installer_windows.exe
是: application/x-msdownload
從 http://phet.colorado.edu

Firefox 應該如何處理此檔案?

開啓方式 (O): Wine Windows Program Loader (...)

儲存檔案 (S)

對此類檔案自動採用此處理方式。(A)

取消 確定

按下確定後開始下載

使用 Linux 的朋友們，下載後解壓縮，必要時先把該 bin 檔改成可執行檔，然後用指令 ./xxx (xxx 是指該檔名，以前笨牛就傻傻的跟著說明打指令，後來才知道 ./ 是執行該檔案的意思)

若下載頁直接給 Linux 的 bin 檔無法安裝時，請下載 ISO 檔 (同一網頁的下方，看到 Creating an Installation CD-ROM，下載後直接滑鼠雙擊進入 ISO 檔，把給 Linux 的 bin 檔解出來，就可以安裝 (未必要燒成光碟)。因為之前笨牛發現直接給 Linux 的 bin 檔無法安裝，才想到用可以燒成 CD-ROM 的 ISO 檔，裏面有 3 個檔案，分別是給 Windows 系統，給蘋果系統，給 Linux 系統。

Creating an Installation CD-ROM

You can make a CD-ROM for doing the full PhET installation on computers without Internet access. You will need a computer equipped with a CD writer, a blank CD, and an Internet connection. Please **contact PhET** help with any questions.

Follow the instructions below:

- Download the **PhET CD-ROM Distribution archive** onto your computer (270 MB).
- Extract the contents of the archive (on most operating systems, this is done by double-clicking the downloaded file).
- Copy all the files to the CD-ROM.
- Please remember to periodically check for updated versions of the PhET simulations.

當然，若是朋友們需要分享給朋友，不想浪費網路資源，或是網路速度過慢時，燒成光碟倒是不錯的作法，這就看各位的彈性應用。

此外，PhET 團隊也很歡迎使用者們的回饋與反應
<http://phet.colorado.edu/contribute/index.php>

例如可以向 PhET 團隊分享使用 PhET 教學的觀念問題，問題集，教學計劃與教學活動；建議製作教學的點子；捐款及翻譯。講到這個翻譯，笨牛就覺得慚愧，人家 PhET 團隊幾個月前就答應我們可以進行翻譯，而且翻譯完畢可以回報到官方網站，此後無論在世界哪個角落，都可以下載到我們翻譯教學的.....只是笨牛與 Tryneeds 中文化團隊實在太忙，加上翻譯這個有點技術上的難度，希望我們可以儘快完成。服務大家。

Contribute

Academic Contributions

If you have developed concept questions, problem sets, lesson plans, and other educational activities based on PhET simulations that may be of use to others, we encourage you to share your work with other educators by **contributing it to PhET**.

Suggest a Simulation

If you have an idea for a PhET simulation, please **let us know**.

Financial Contributions

Our philosophy is to make PhET simulations freely available to all users around the world. They have now been run millions of times from our web site, and the full PhET suite has been installed on thousands of computers. But while the simulations may be free to users, they are expensive for us to create, test and maintain, and our financial support is limited. If you would like to help make it possible for us to develop more and better simulations, please contact phethelp@colorado.edu or phone (303-492-4367) to find out how you can make a tax deductible contribution.

PhET would like to thank **our sponsors**, and **Royal Interactive** for original site design and layout.

Translate Simulations

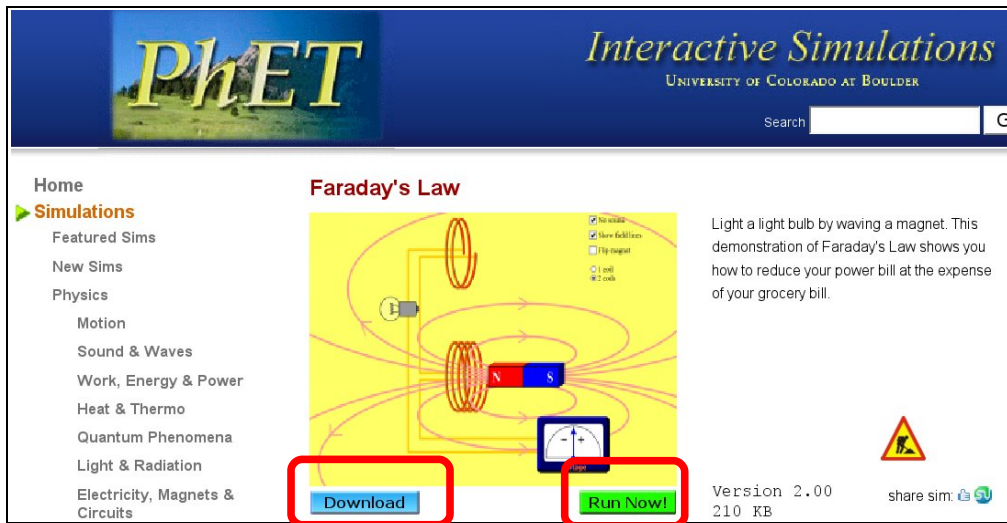
The PhET simulations have been written so that they are easily translated to languages other than English. The process uses a simple tool called the **PhET Translation Utility**, and requires no programming skills.

Translating the PhET simulations into other languages greatly expands our target audience, and helps us accomplish the **PhET mission**.

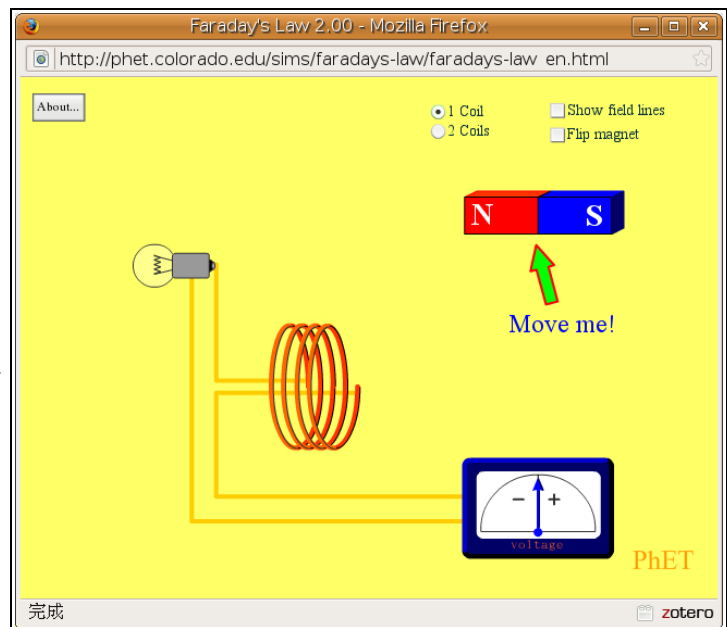
這裡以物理的法拉第定理為例子

http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Faradays_Law

說明如何線上使用或是下載使用（若進行上述的安裝動作就不需要這樣個別的進行）



若選擇 Run Now! 直接執行，則需要時間下載，下載完成後會跳出下方的畫面。好處是不用安裝，但是在沒有網路時就無法進行



若選擇 Download 下載，下載後開啓一樣可以進行教學。好處是可以在沒有網路的環境中進行教學。當然笨牛建議若硬碟空間夠大可以先下載，或者全套安裝更好。

有時候用滑鼠雙擊該檔案，若無法出現教學的畫面時，可以用滑鼠右鍵叫出選單，選擇 Java 來執行。

3-3 pH 值的觀念教學

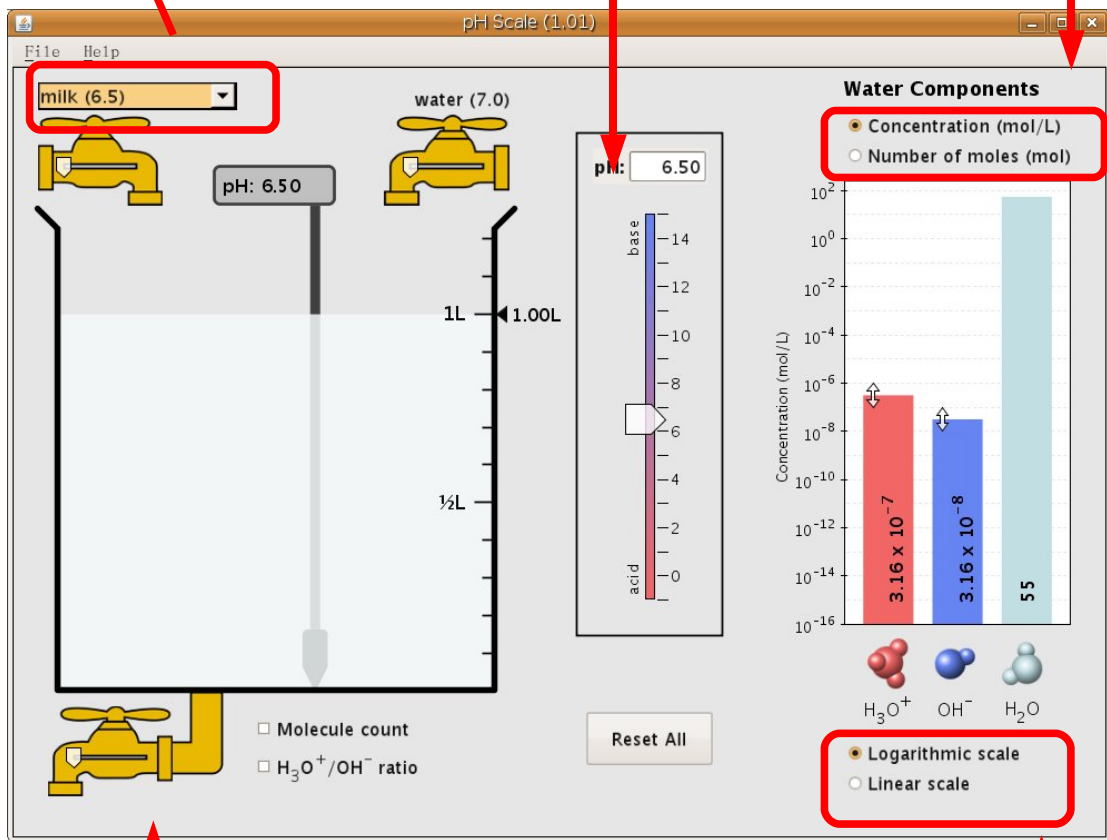
pH 的觀念教學請見 http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=pH_Scale
 中文化下載 [http://phet.colorado.edu/admin/get-run-offline.php?](http://phet.colorado.edu/admin/get-run-offline.php?sim_id=225&locale=zh_TW)
[sim_id=225&locale=zh_TW](http://phet.colorado.edu/admin/get-run-offline.php?sim_id=225&locale=zh_TW)

- milk (6.5)
- drain cleaner (13.0)
- hand soap (10.0)
- blood (7.4)
- spit (7.4)
- water (7.0)
- milk (6.5)
- coffee (5.0)
- beer (4.5)
- soda pop (2.5)
- vomit (2.0)
- battery acid (1.0)
- custom liquid

有數種生活上常見溶液及其 pH 可以選

調整 pH
 可以輸入 pH，或是移動游標到適當的 pH 值。調整後左方的燒杯圖內的圖示與右方的濃度都會跟著調整

單位設定
 可以設定為莫耳濃度或是莫耳數



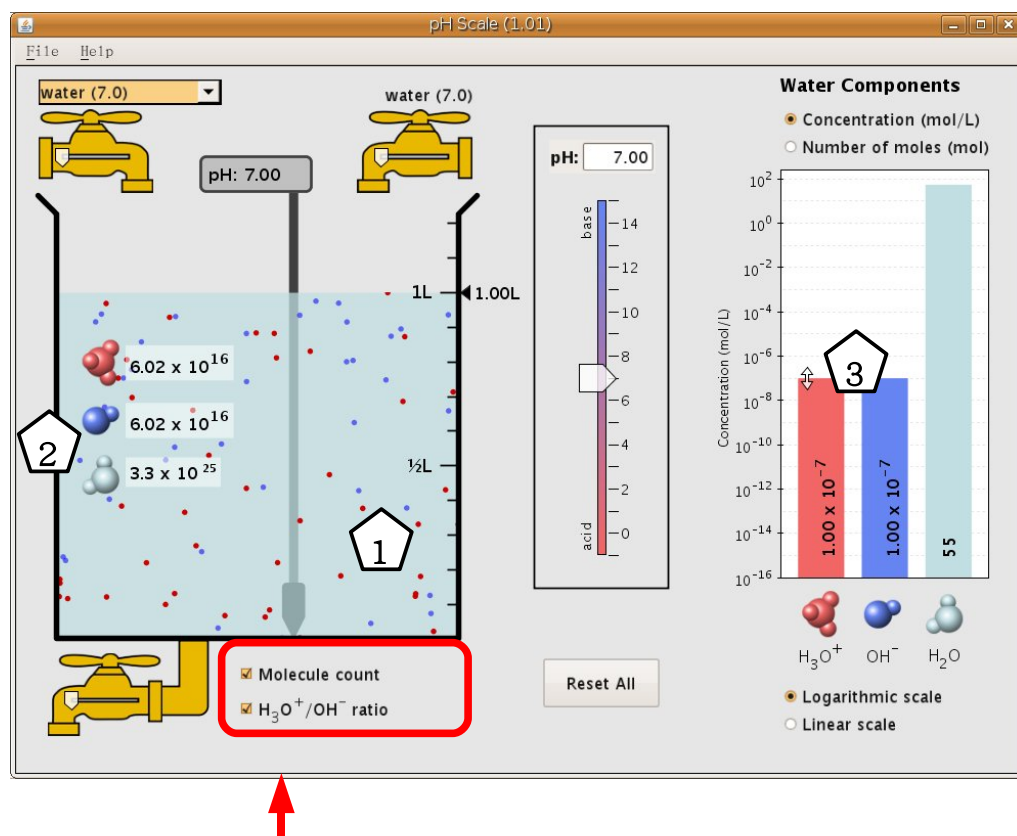
這水龍頭可以放出燒杯的水，以減少體積。而右上方的是加水，左上方的是加入選定的液體。

數值設定
 可以設定 logarithmic scale (log 值，對數值) 或是 linear scale (線性值)。不過設成線性值時，會看到酸和鹼兩個的濃度幾乎是躺在起點，因為水實在是太高了。

這個 pH 教學，有個相當棒圖示法的把 pH 的概念簡單的標達出來：顯示 Molecule count (分子數量) 及 $\text{H}_3\text{O}^+/\text{OH}^-$ ratio (酸鹼分子的比值)

這裡選擇水，pH 7.0 部份液體解釋為何這教學概念這麼棒。

首先選擇燒杯裝的液體是水，再把 Molecule count 及 $\text{H}_3\text{O}^+/\text{OH}^-$ ratio 打勾



1. 燒杯中的紅點代表酸 (H_3O^+)，藍色點代表鹼 (OH^-) (請見1)，在 pH=7.0 的情況下可以從圖片中感覺出來，無論是 H_3O^+ 或 OH^- 總數都不多 (請對照偏酸或是偏鹼的溶液)。

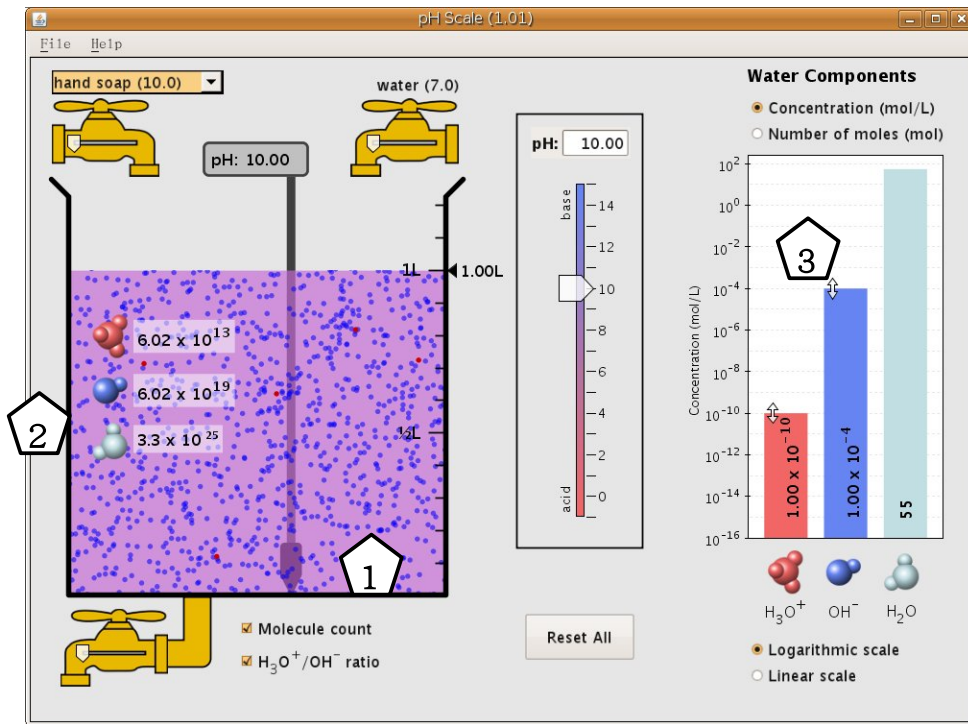
[很抱歉，若您是看到笨講義的紙本，很可能只有黑白無法顯示顏色的差別，因此笨牛建議您可以看電子檔]

2. 此時在一公升的水中， H_3O^+ 及 OH^- 總數都是 6.02×10^{16} 個 (請見2)，而水分子是 3.3×10^{25} 個。老師們從這可以加入水或是放水，改變分子的總量，但是濃度還是不變，強調濃度的觀念

3. 請見3，此時 H_3O^+ 及 OH^- 的濃度都是 6.02×10^{-7} (mol/L)。

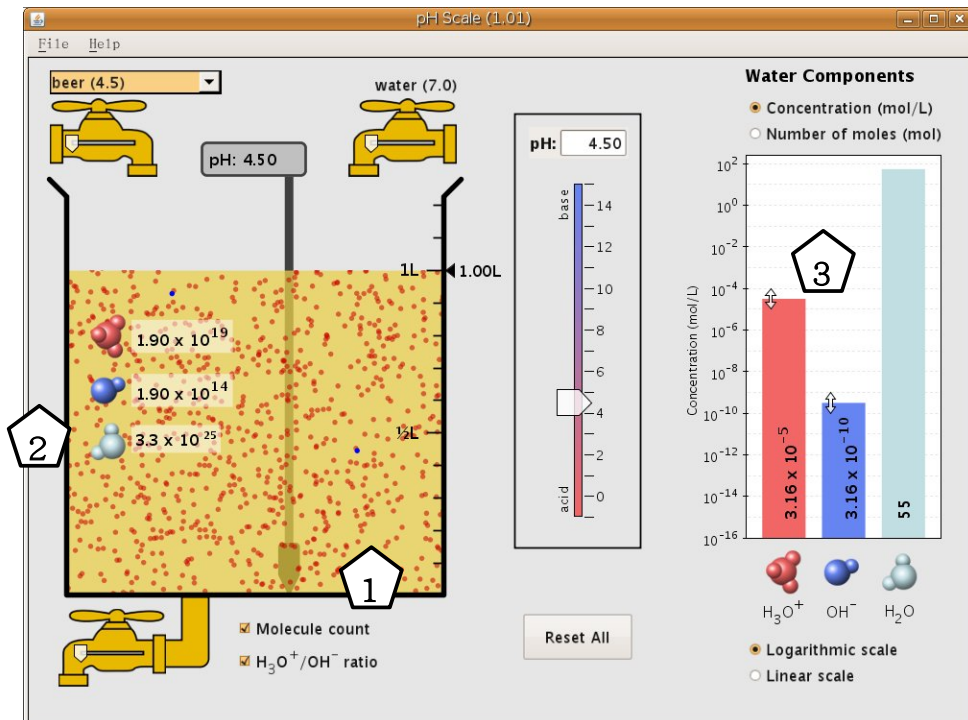
若以 Hand soap (香皂或是洗手乳) 的 pH 10.0 為例，

酸鹼分子比例中，藍色多很多，而且酸鹼分子得總數比在純水還多；此時 $[\text{OH}^-] = 10^{-4} \text{ M}$ ，在一公升液體中的總數為 6.02×10^{19} 個



以 Beer (啤酒), pH 4.5 為例，

酸鹼分子比例中，紅色多很多，而且酸鹼分子得總數比在純水還多；此時 $[\text{H}_3\text{O}^+] = 3.16 \times 10^{-5} \text{ M}$ ，在一公升液體中的總數為 1.9×10^{19} 個。



在 pH-scale 網頁的下方 (見 http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=pH_Scale_) 會看到

TOPICS

Main Topics

- pH
- Dilution of acids and bases
- Molecular model of hydroxide and hydronium in acids and bases
- Relationships of pH to common measurements of solutions

Related Topics

- **pH, hydronium, concentration, hydroxide, moles, molarity, dilution, molecular model, chemistry**

Sample Learning Goals

- Determine if a solution is acidic or basic
- Place acids or bases in relative order
- Describe on a molecular scale, with illustrations, how the water equilibrium varies with pH
- Determine concentration of hydroxide, hydronium and water at a given pH
- Relate liquid color to pH
- Predict (qualitatively and quantitatively) how dilution and volume will effect the pH and concentration of hydroxide, hydronium and water

這裡列出有關 pH-scale 的學習主題與學習目標

TEACHING IDEAS

Tips for Teachers

The **teacher's guide** contains tips for teachers created by the PhET team (PDF).

Ideas and Activities for this Sim

There are 3 contributions listed.

▲ Title	Author	Level	Type	Updated
Onderzoek de pH van vloeistoffen bij volumeverandering en verdunnen	M. Lubeck	MS	CQs Lab HW Demo	4/09
pH Learning Goals by development team (Inquiry Based)	T. Loeblein	Other	Other	11/08
pH Scale inquiry-based intro to acid-base	T. Loeblein	HS UG-Intro	Lab	4/09

這是 PhET 提供的教師指引 PDF 檔 (英文) 可以下載

這裏可以下載使用者分享使用 pH-scale 的教學講義與教案。不過目前都是英文。

PhET 團隊歡迎使用者上傳他們的教學計劃或是教案

Submit Your Ideas & Activities

Note: The maximum file size is 64M, with a maximum upload of 64M at a time.

Required fields are marked with an asterisk (*).

title*

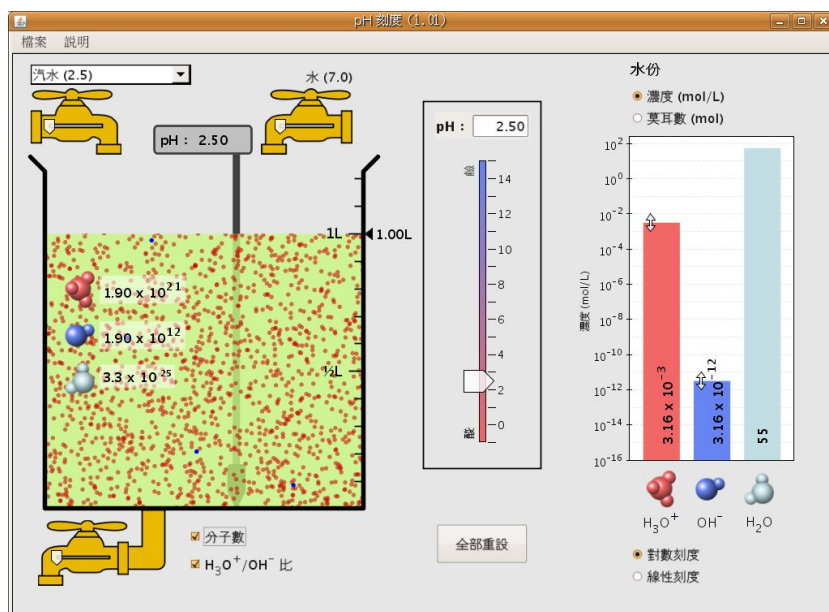
file(s) 瀏覽...

grade level(s)*

Check the **PhET design guidelines (PDF)**

網頁在往下看，可以看到多種語言的版本，其中可以看到有個 Chinese, Taiwan. 這是高雄市立瑞祥高中的研資組長謝祿適博士所翻譯的. 笨牛在 2009-03-06 在高雄中學化學學科中心研習時認識了謝博士, 他了解之後願意協助這方面的翻譯, 所以感謝謝博士的協助. 當然, 尚未翻譯的教學主題還很多, 有興趣參育的朋友們歡迎跟笨牛連絡.

TRANSLATED VERSIONS		
Run localized		Download
中文 	Chinese, Taiwan	Download
Nederlands	Dutch	Download
Français	French	Download
polski	Polish	Download
Português 	Portuguese, Brazil	Download
русский язык	Russian	Download
Español	Spanish	Download



3-4 鹽與溶解度教學

網址：http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Salts_and_Solubility

本教學有 3 個子單元，我們先看 Table Salt (食鹽, NaCl)。

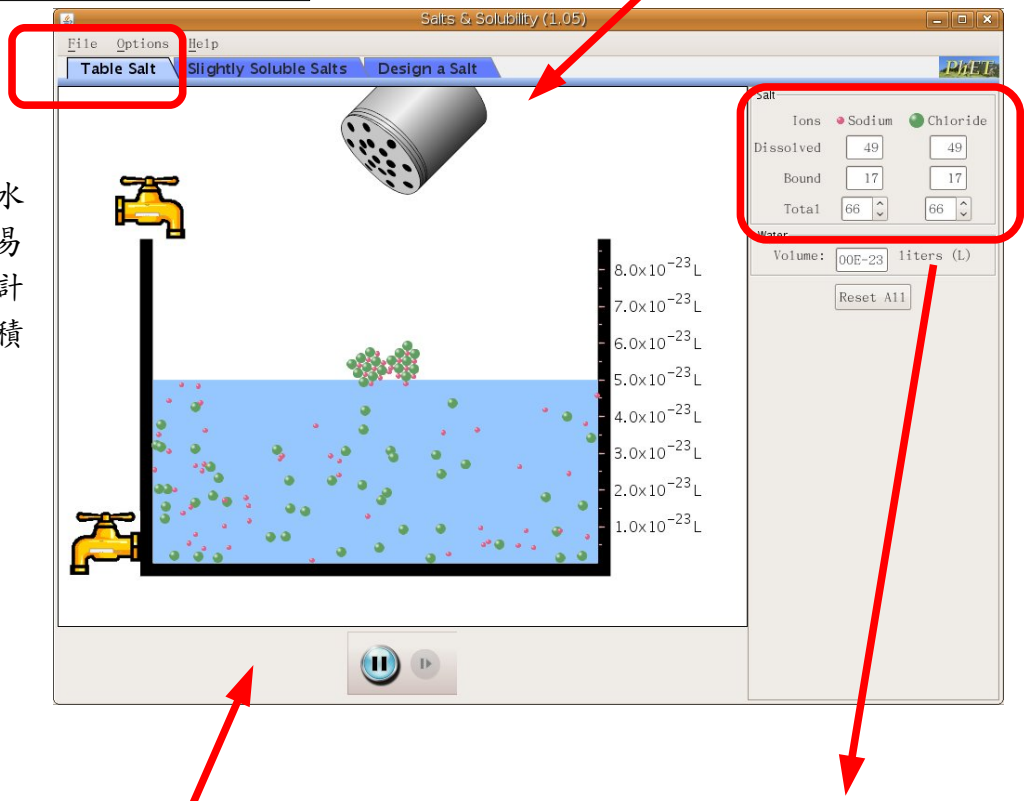
食鹽 (Table Salt)

食鹽的特色是溶解度高。

1. 先選 Table Salt 子單元

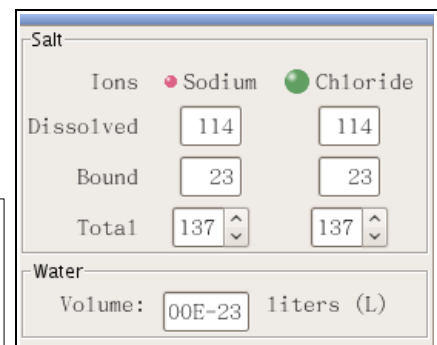
2. 用滑鼠晃動鹽瓶，就會灑出鹽巴

可以利用水龍頭加水或是排水以調整容易的體積。為了配合計算，他們把水的體積設為 5×10^{-23} 公升。



3. 食鹽掉入水中後會立刻解離，可以看到氯離子與鈉離子解離後各自在水裏游泳。

4. 加入後，未溶解的 (Bound) 分子數會逐漸變成溶解的，從這裡可以觀察到解離與未解離的比例。其實大家都知道 NaCl 的溶解度極高，所以無論加多少，都會溶解/解離。



難溶鹽 (Slightly Soluble Salts)

難溶鹽正是這部份學習的關鍵。

1. 先選 Slightly Soluble Salts 子單元

3. 用滑鼠晃動鹽瓶

2. 選不同的鹽，選單中有數種難溶鹽。

File Options Help

Table Salt Slightly Soluble Salts Design a Salt

Mercury(II) Bromide

Dissolved	14	32
Bound	65	125
Total	79	158

Water
Volume: 00E-16 liters (L)

Reset All

Mercury(II) Bromide

- Mercury(II) Bromide
- Silver Bromide
- Copper(I) Iodide
- Strontium Phosphate
- Thallium(I) Sulfide
- Silver Arsenate

4. 溴化銀掉入水中後，只有部份解離，多數沈澱在下面。動畫中有個地方做的很細膩，游離的陰陽離子會形成沈澱，沈澱的鹽會溶出，表達動態平衡的觀念。

Ions Mercur... Bromide

Dissolved	12	34
Bound	85	160
Total	97	194

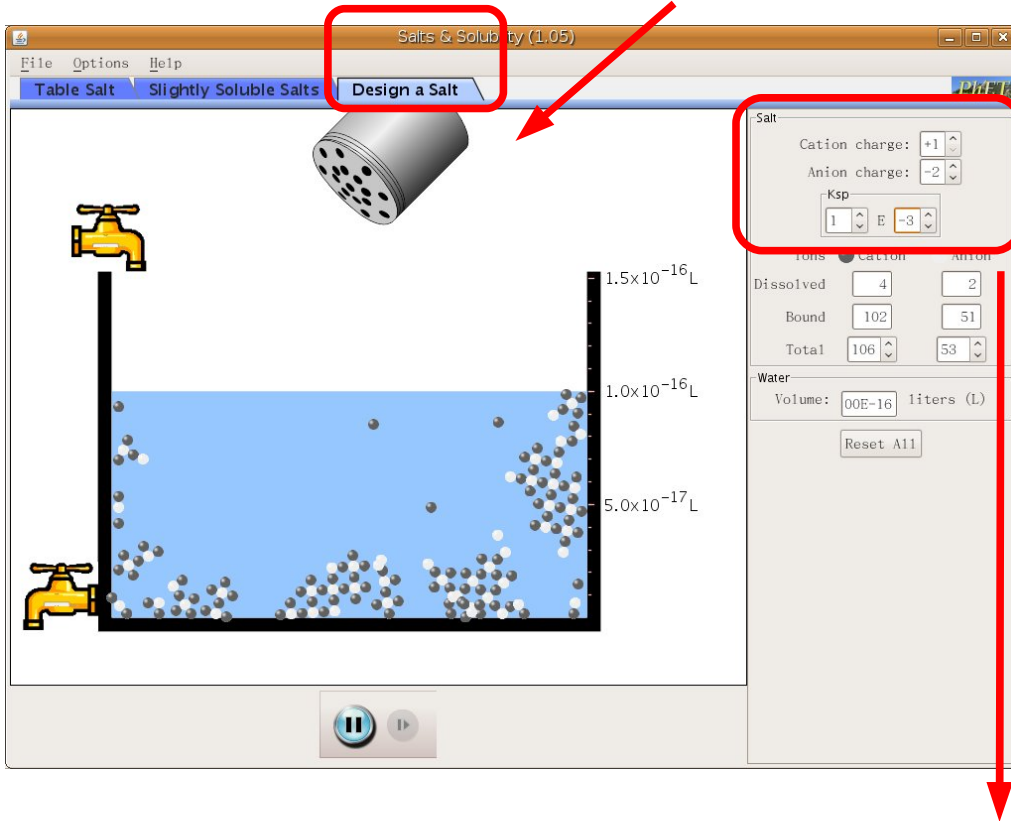
Water
Volume: 00E-16 liters (L)

5. 一段時間後，在固定體積 (10^{-16} L) 之下，溴化銀解離與未解離會達到平衡，而且數字會略為上下跳動，表示溶解與形成沈澱同時發生，在固定的液體體積下，可溶解的鹽大致上保持在一個定值，多加的只是沈澱。這裡可以改變水的體積，然後部份沈澱的鹽會變成溶解的。

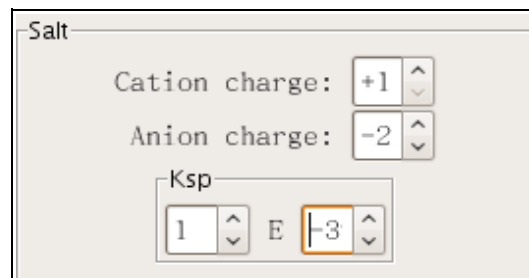
自行設計鹽的性質與 K_{sp} 值

1. 先選 Design a Sale 子單元

3. 用滑鼠晃動鹽瓶



4. 可以看到自行設計的鹽的溶解狀況。這裡有個有趣的地方，就是液體中已經加入了鹽，此時調高 K_{sp} 值會使沈澱變成溶解態，若調低 k_{sp} ，會看到游離的離子逐漸附在燒杯周圍形成沈澱。



2. 設定陽離子及陰離子的電荷，設定 K_{sp} 值。

3-5 可逆反應的教學

網頁 http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Reversible_Reactions

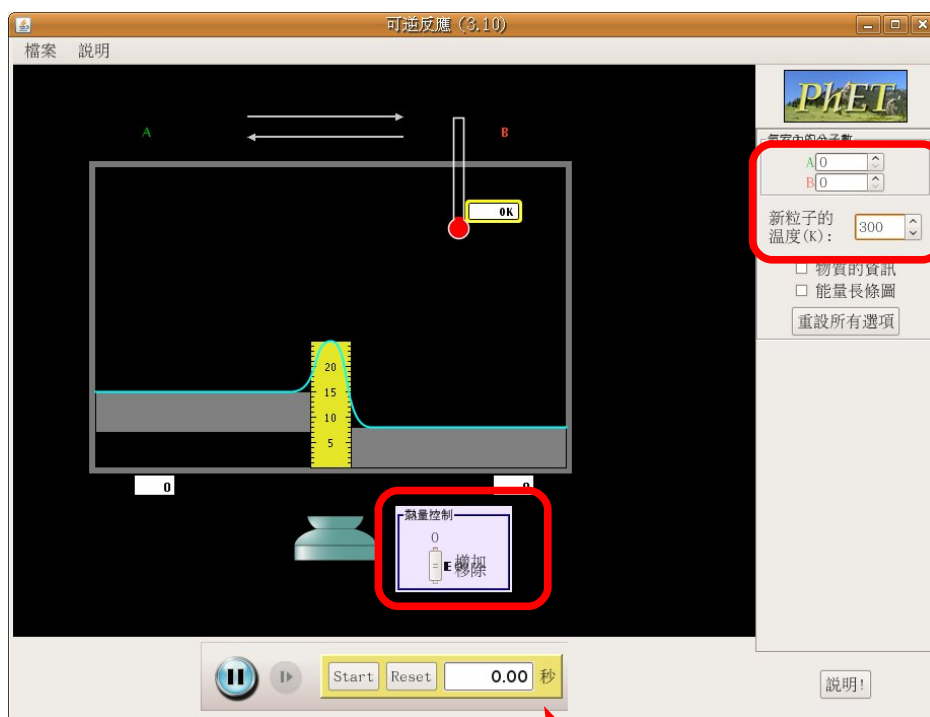
中文教學下載 [http://phet.colorado.edu/admin/get-run-offline.php?](http://phet.colorado.edu/admin/get-run-offline.php?sim_id=154&locale=zh_TW)

[sim_id=154&locale=zh_TW](http://phet.colorado.edu/admin/get-run-offline.php?sim_id=154&locale=zh_TW)

(中文化的部份是由高雄瑞祥高中謝祿適博士所翻譯)

1. 用滑鼠調高或調低反應物及生成物的位能，調整活化能。

這裡的觀念是若生成物位能比反應物位能低，則反應偏向生成物。活化能的高低也會影響。當活化能與反應物位能相同時，而生成物位能比較低時，是自發性反應，會看到多數的A分子輕鬆的變成B分子。



2. 設定分子數。

A 是反應物

B 是生成物

例如設定 100 個 A 分子

3. 設定溫度

3. 熱量控制

向上推會出現火，代表加入熱量

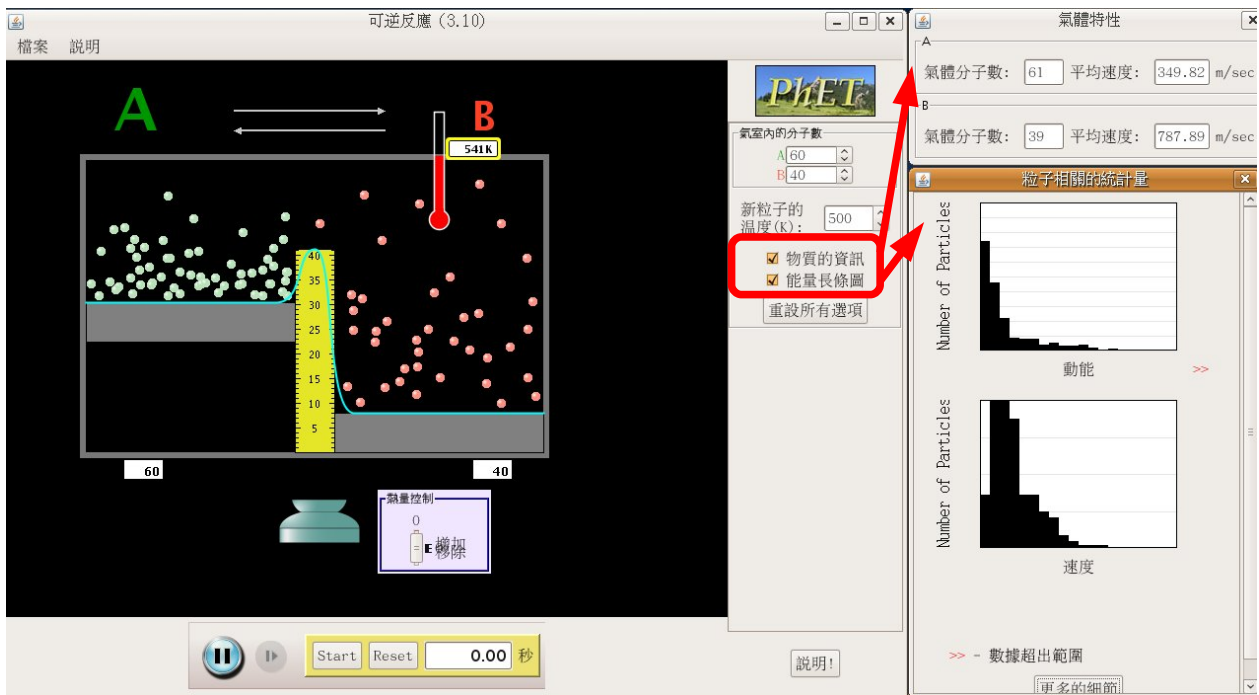
向下推則出現冰塊，代表降溫

(笨牛覺得這部份很有趣，用火與冰這種圖像取代文字敘述或是數據的表達，更能啟發學生的興趣)

例如設定有 100 個 A 分子，0 個 B 分子，溫度為 500 K，按下 enter 後就開始反應。

若把物質能量及能量長條圖打勾，會出現相關的資訊，這部份對連接分子運動速率與分子能量分佈的觀念很有幫助。特別是熱量控制，提升溫度時除了可以看到圖中的粒子變得活潑，同時分子速度也增加了，而能量分佈圖也改變了。

還有個可愛的地方，就是平衡式綠色的 A 一開始很大（當 A 設為 1000 個分子時會大到不得了），而紅色的 B 非常小，當反應接近平衡時，Ab 的字形也會改變。



真的，笨牛第一次看到這反應平衡的教學，就覺得當年高中化學要是有這個不知有多好。幾次笨牛向朋友們介紹 PhET 的化學可逆反應，朋友們都說當年要是有這個，就不用死背那麼多觀念，也有朋友說化學可能就不會被當了。據了解，教育心理學上也提到用圖像式的表達會比以純文字的表達來的有效率。

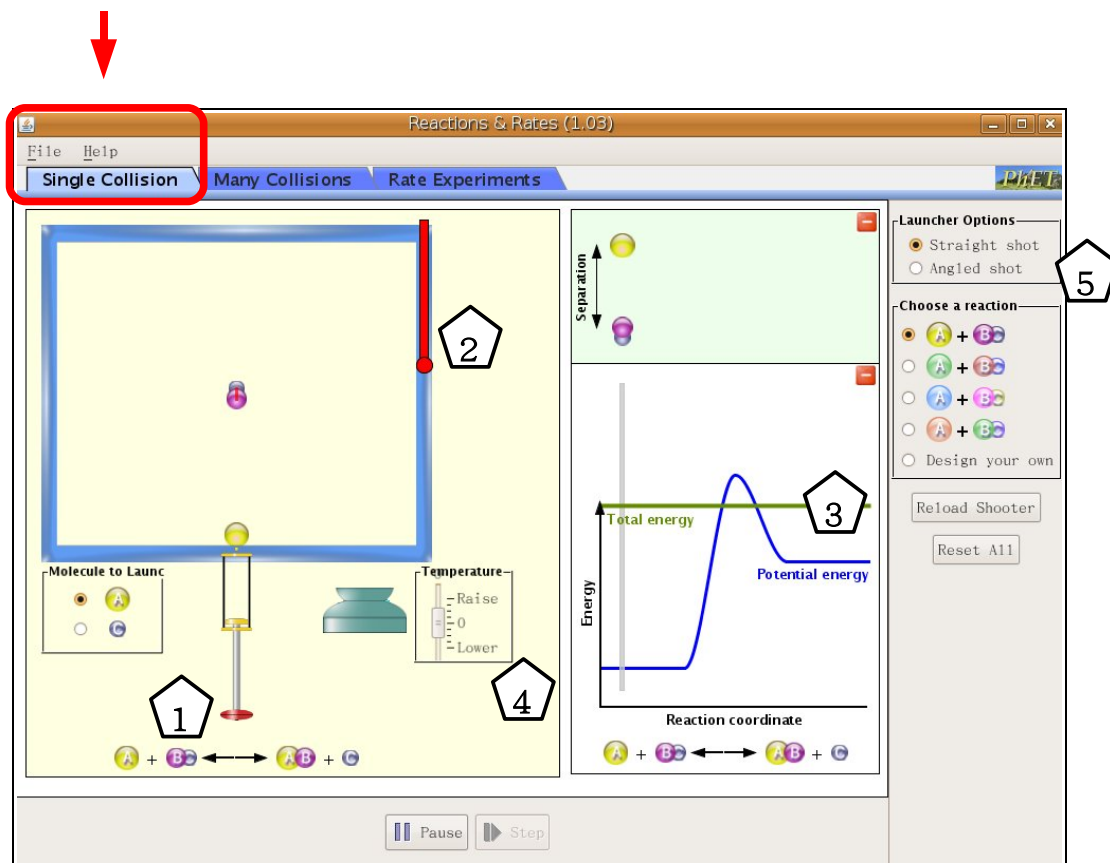
現在，只要化學老師願意使用這項武器，不但這部份備課很輕鬆，而且把抽象化學平衡觀念，藉由互動式教學，引起更多學生的興趣。更方便的是，把網址給學生，學生在家也可以看，可以課前預習，可以課後複習，可以看一遍，也可以看十遍，絕對可以增進學生的學習效率。

3-6 化學反應與反應速率

就分子碰撞反應來說，兩個重要的關鍵，一個是分子的動能，一個是碰撞的位向，而這個教學可以透過互動式教學，把這些觀念清楚的傳達。

下載的網頁 http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Reactions_and_Rates (中文化還在努力中)

先選 Single Collision

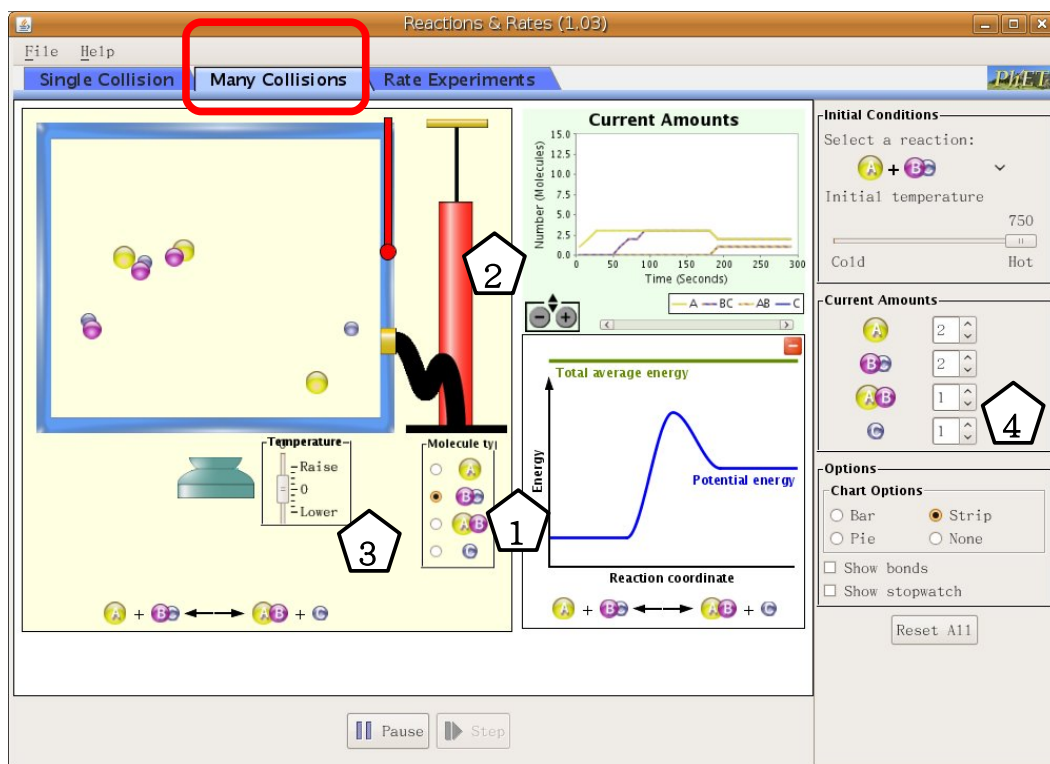


像打彈子般的，用滑鼠下拉把手（請見1），此時會看到把手越向下，溫度計的溫度會上升（請見2），同時位能圖的綠色線（total energy）也會升高（請見3）。

本教學有趣的是，若彈子的拉到底，total energy 仍未超過活化能時，代表能量不夠，反應不會發生（只看到無效碰撞）。此時可以點火（請見4），就會看到 total energy 超越活化能

有關碰撞位向的概念，本彈子台，喔不，本互動式教學也設計的相同的概念，可以選擇不同的角度打彈子（請見5，選 angled shot），在確定 total energy 超過活化能後，選擇不同的彈子發射角度，會看到兩個分子即使有碰撞，即使能量夠，為必會發生反應，經過一段時間後，等位向對了就會發生反應，由 $A + BC$ 變成 $AB + C$ 。

上面的單元使用單一的反應物，可以請楚解釋位向問題（不然一堆分子飛來飛去會眼花撩亂）這裡可以選擇 Many Collisions



先選要打入氣體的種類（請見1），例如先後選擇反應物A及BC，若是選A及C，可以猜到的不會有反應。在利用打氣筒把所選的分子打入（請見2），打完後可以換氣體的種類。

此時若 total energy 沒有跨過活化能，就不會有反應，但是可以藉由火烤（請見3）以提高能量，增加有效碰撞的機會。

同時可以觀察內部分子數量的改變（請見4），例如只打入反應物A及BC（當然若只有A而沒有BC就不會有反應），在 total energy 沒有超過活化能前，生成物的數量零。

還可以有個玩法，在反應物可以跨過活化能形成生成物後，此時會有逆反應而逐漸達到平衡，這時候可以加上冰塊降溫，讓 total energy 低於活化能，就會發現無法產生逆反應，而反應物與生成物的數量不會改變。

3-7 其他化學主題

很抱歉，其他的化學主題笨牛暫時沒有時間處理，這裡先簡單的列出來，有興趣的老師學生們請自行玩玩看，有問題歡迎來信討論。

物質的三態 (States of Matter)

http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=States_of_Matter

核分裂 (Nuclear Fussion)

http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Nuclear_Fission

氣體的性質 (Gas Properties)

http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Gas_Properties

溫室效應 (The Greenhouse Efftect)

http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=The_Greenhouse_Effect

氫原子模型 (Models of the Hydrogen Atom)

http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Models_of_the_Hydrogen_Atom

這些都是很棒的互動式教學，而且除了化學，還有其他課目的教學，各位朋友們一定要試試看。

第 4 章 Avogadro 超強的化學立體分子繪圖, 看圖, 教學軟體

4-1 有關 Avogadro

授權: GPL, 自由授權

費用: 免費

支援的作業系統: 多種作業系統

中文介面: 有, 由笨牛及所屬的 Tryneeds 台灣中文化團隊規劃, 進行翻譯.

安裝方式: 最方便的添加和刪除或套件管理程式 (synaptic), 或下載最新版本 ([下載處](#))

官方網頁: http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page (英文)

官網的擷取畫面: [擷取畫面](#) (英文), [線上說明](#) (英文)

適合對象: 高中生, 中學老師, 大學生, 研究生及大學教職員等

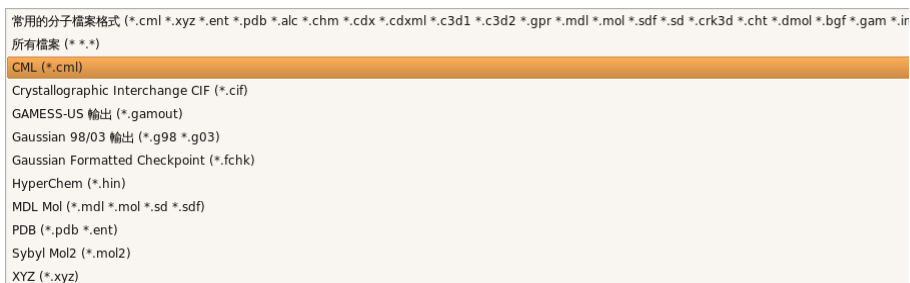
Wekey 說明: <http://wekey.westart.tw/Avogadro>

說明:

原本笨牛都用 Ghemical 作為化學立體分子的繪圖軟體, 但是自從遇到了 Avogadro (正是亞佛加厥的英文名) 之後, 就先把 Ghemical 暫時放一邊, 同時連絡作者群, 取得許可後進行中文化. Avogadro 是跨平台的軟體, 不只是 Linux, 連蘋果系統及微軟系統使用者都可以用.

而且 Avogadro 也是看圖軟體, 可以讀取的多種化學檔案, 也可以存成多種檔案 (請見下圖), 也就是與其他軟體及化學檔案的支援性相當的棒.

Avogadro 不但可以看, 可以畫, 還可以調整鍵角, 調整平面, 計算距離, 計算夾角, 這些特性用來進行教化學課程 (包括高中及大學課程), 可以把不



易懂的觀念變成圖形, 這樣有助於學生學習. 而且有中文化介面, 這樣高中老師就不用怕學生使用上有困難, 而且大學修化學課的新生也容易上手 (英文一向不靈光的笨牛, 回想當年狂查字典的日子, 忍不住差點落淚, 只有振作精神, 多進行一些中文化, 就是希望新生們可以多一些時間適應與學習, 不要被爛英文打斷學習化學的熱誠)

在此先說明, 雖然最新版本是 0.9.4 (可以把官方網頁的套件網址加到套件庫), 但是中文化的檔案有些問題 (無法顯示中文介面, 而是英文介面), 自行安裝的使用者需要手動更換翻譯檔, 若是使用 Ezgo 等, 可能就已經修改好了. 但是這問題還是要儘快向原作者群反應. 在修復前, 若需要中文翻譯的檔案, 請寫信給笨牛.

4-2 基本繪圖功能

選擇元素

1. 先選擇畫圖模式，有隻筆的圖示
2. 選擇元素，雖然預設是碳，但是有時候需要其他的，此時按下選單，有數個常見的可以選。若需要更多的選項，再按下其他，就會出現整個週期表。

說明：笨牛在翻譯這裏時，保留英文原文，加上中文，如下圖中的 Barium (鋇)，希望這樣有助於年輕朋友們被化學單字。圖中設定自動加上氫，此時軟體在使用者畫完後會自動加上適當數量的氫，而且其分子形狀不會差太多。例如圖中紅色是氧，藍色是氮，灰色是碳，在滑鼠點完後，自動加上白色的氫。

不要碰！根據經驗，切換到檢視2
常會引起系統當機

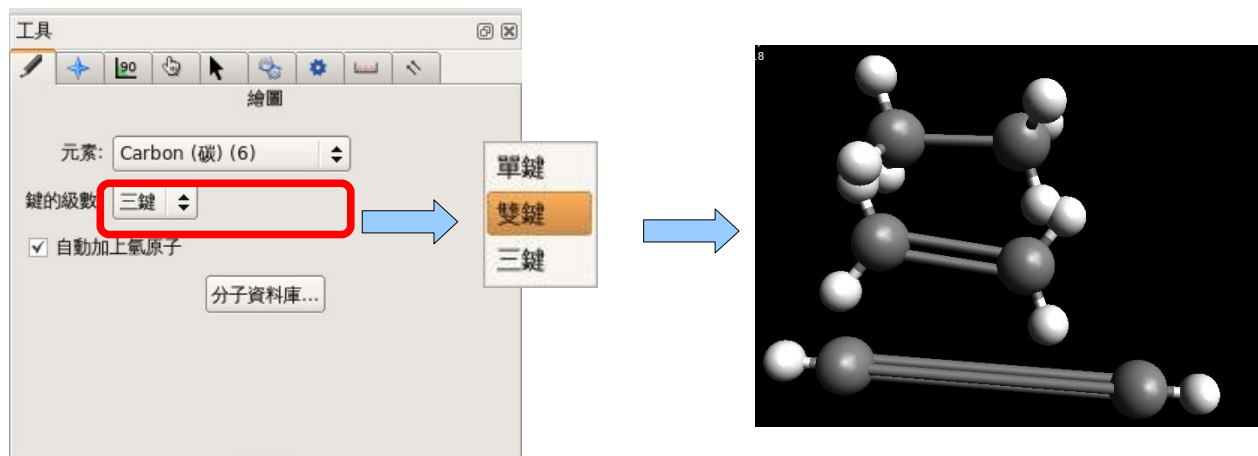
The screenshot shows the Avogadro software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a molecule. The left sidebar contains a menu for selecting elements, currently set to 'Carbon (碳) (6)'. A red box highlights this menu, and a blue arrow points to a dropdown list of elements: Hydrogen (氫) (1), Boron (硼) (5), Carbon (碳) (6), Nitrogen (氮) (7), Oxygen (氧) (8), Fluorine (氟) (9), Phosphorus (磷) (15), Sulfur (硫) (16), Chlorine (氯) (17), Bromine (溴) (35), and 其他... (Other...). A red box highlights the '其他...' option, and a blue arrow points to a 'Periodic Table' window. The periodic table window shows the element Barium (鋇) (Ba) highlighted in green, with its atomic number 56 and atomic weight 137.327. A callout box with a speech bubble points to the '檢視2' (View 2) button in the top right corner, warning that switching to this view can cause system crashes.

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb		
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No		

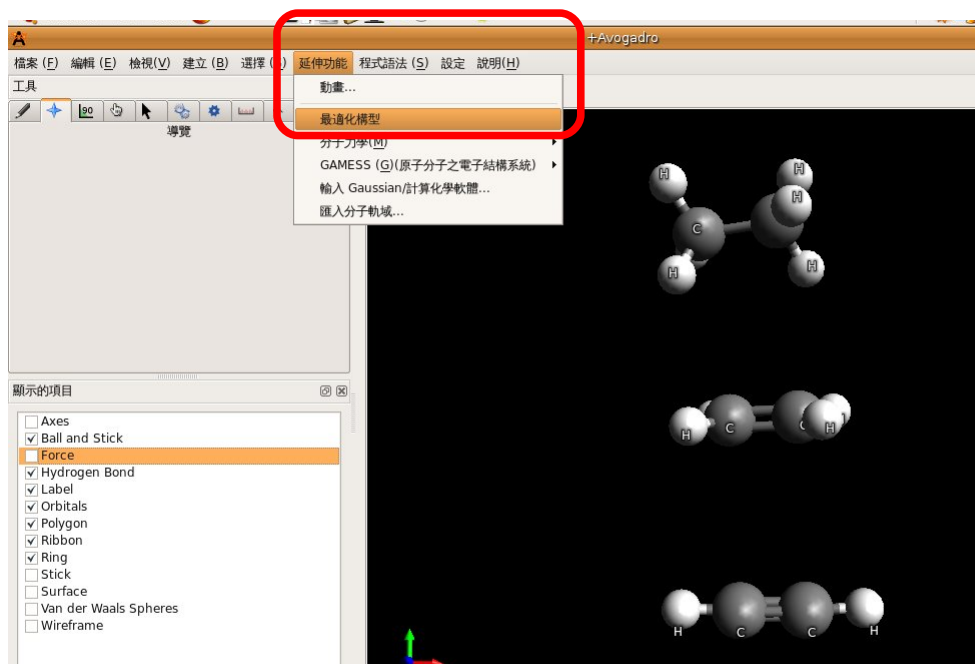
這裡有件糗事，在 2009-03-06 在高雄中學研掉，當時笨牛愣住了，因為根本不知道，此時有位老師出來解救：滑鼠移到要擦掉的原子，按下右鍵就 OK (原來左鍵畫圖右鍵擦掉)。感謝那位老師的解救。

選擇單鍵，雙鍵，三鍵

可以選擇單鍵，雙鍵，三鍵進行繪圖。畫完後會自動加上氫，而且其分子構型大致正確.....除了鍵的長度。



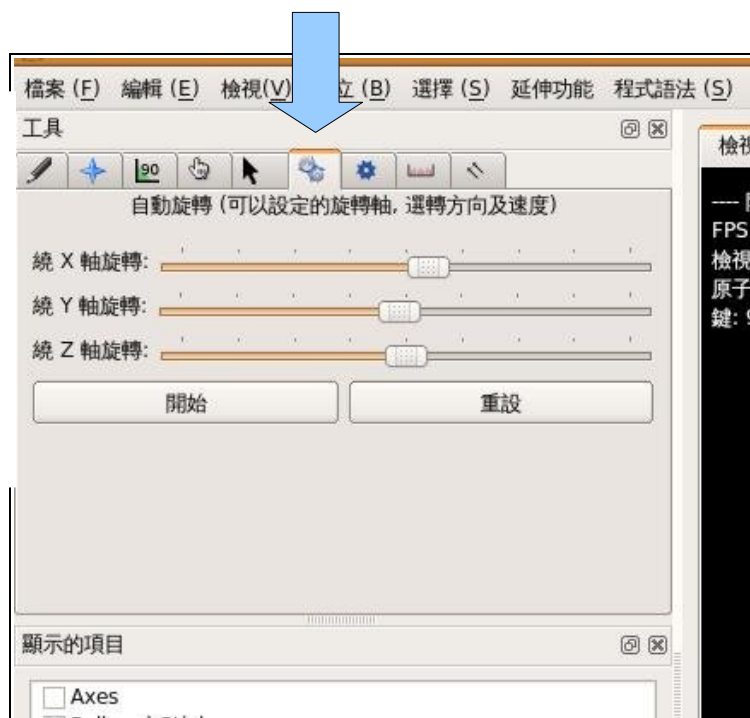
我們都知道，就碳與碳的鍵長，是單鍵 > 雙鍵 > 三鍵。這一點 Avogadro 的作者群早就為大家想好了。只要到延伸功能 > 最適化構型，只要幾秒鐘，軟體自動把我們畫的分子調整到適當的形狀（說明：笨牛遇過一些情況，軟體所調整出來的形狀有時候會與教科書上教的不同，例如水分子的鍵角怪怪的）。在延伸功能的選單中還有其他功能選項，這部份有的已經超出笨牛的理解程度，有的還在摸索，



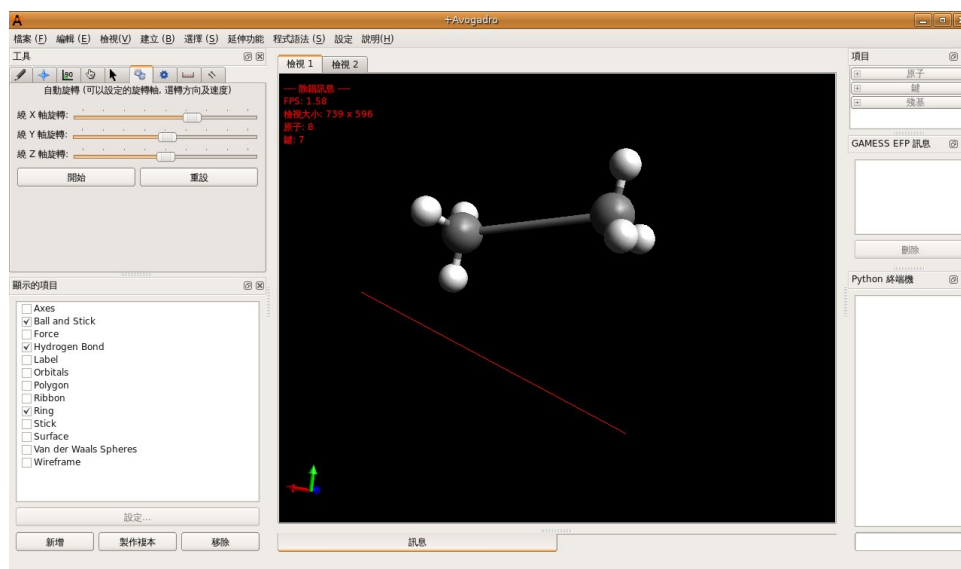
讓分子自動旋轉

想要讓畫好的分子自動旋轉，
這樣就可以從不同角度來看分子，
更能了解分子的立體結構。

點選自動旋轉功能，如箭頭所指，
可以設定對不同的軸有不同的轉速。



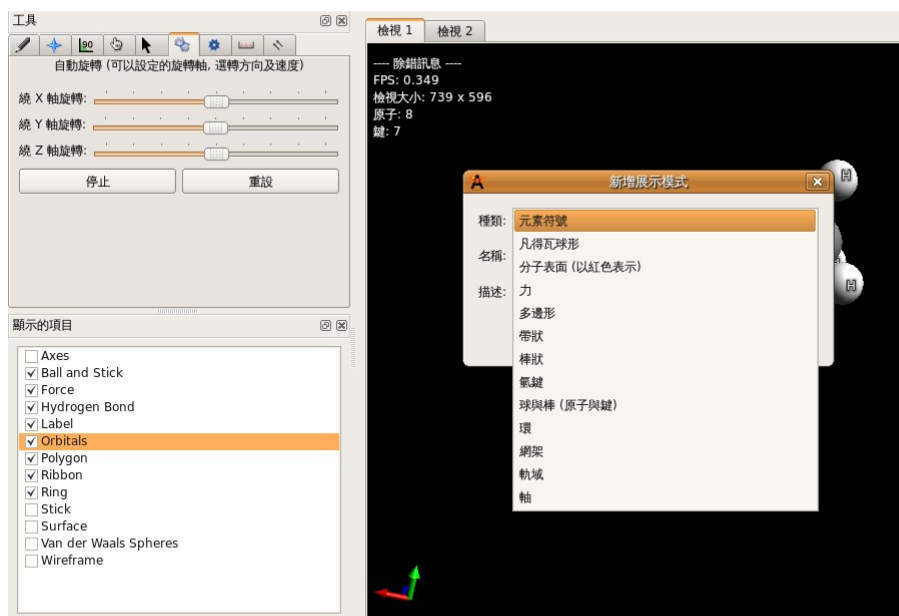
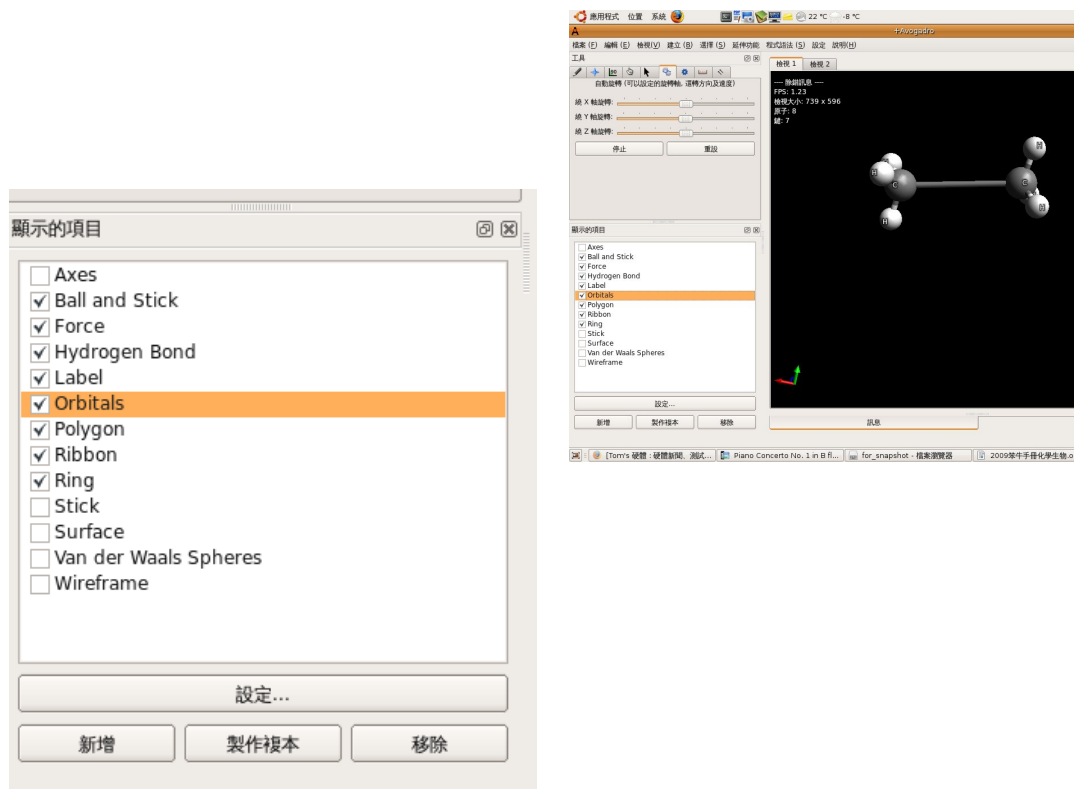
也可以使用滑鼠拖曳的功能決定旋轉的方向及轉速，
如畫面中的紅線是由滑鼠自左上向右下
拖曳，線的方向是轉動方向，線的長短決定轉速。



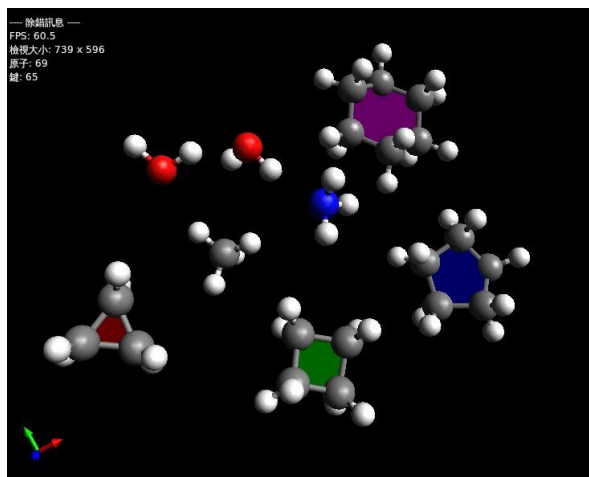
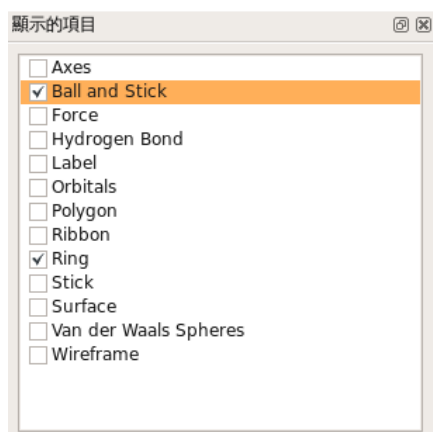
如此一來，老師們就可以輕鬆把分子的立體圖介紹給學生。
學生回家後也可以自己畫，自己玩，
而漸漸學會分子構型。

4-3 Avogadro 的顯示功能

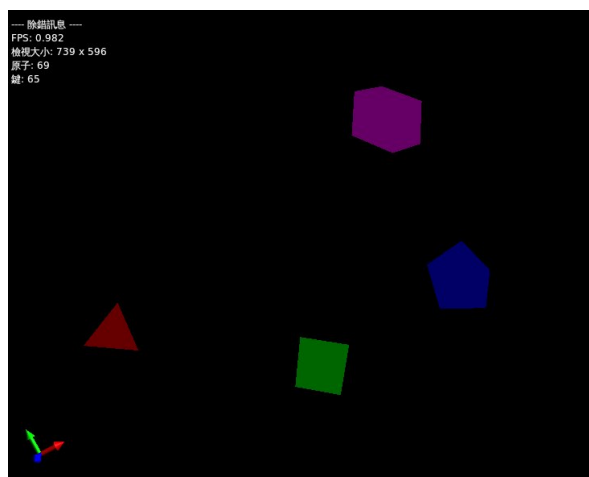
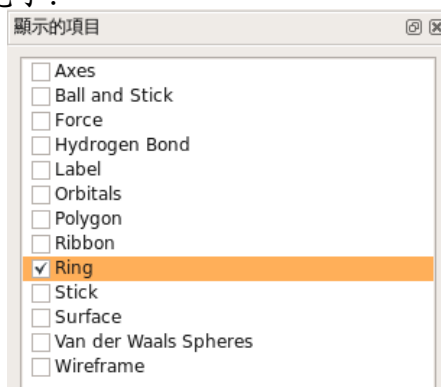
Avogadro 的多種顯示功能也是讓笨牛強力推薦 Avogadro 的原因。



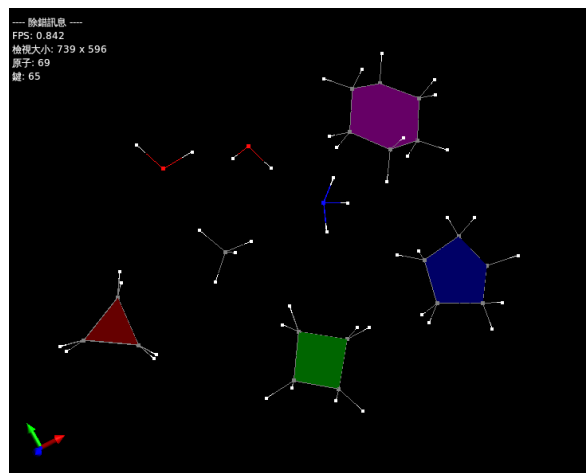
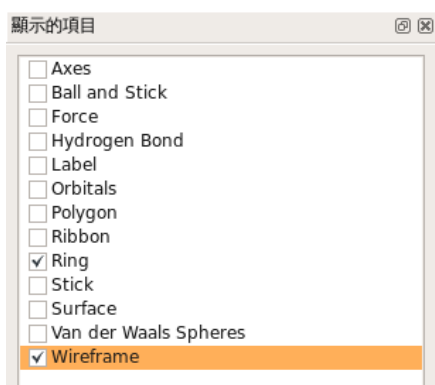
一般顯示 ball and stick(球與棒) 是最常見的模式.



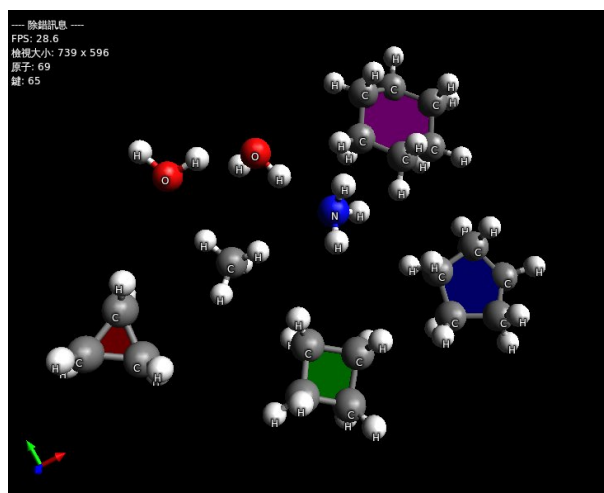
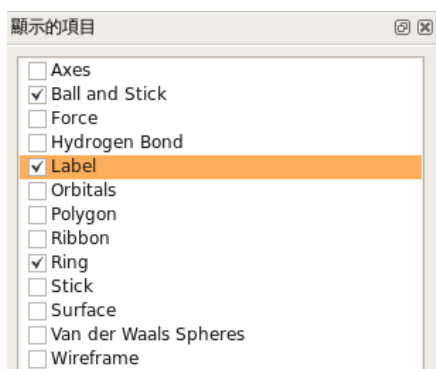
在 Avogadro 中，三，四，五，六等員環有不同的顏色方便辨識（當然也方便教學）
當顯示的項目只留下環時，會發現原子及鍵都看不見了。



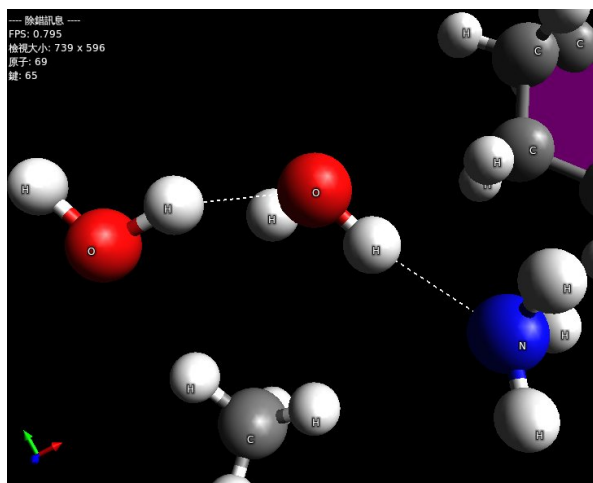
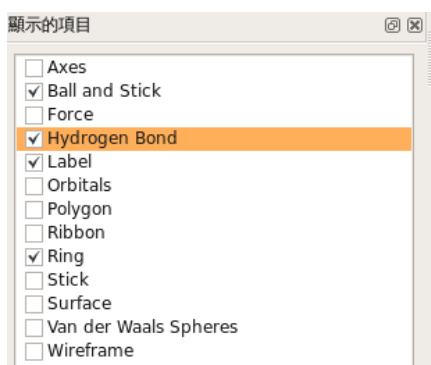
取消 ball and stick, 而用 wireframe 取代, 會看見原子與鍵以不同方式呈現。



而勾選 Label 則是顯示原子符號

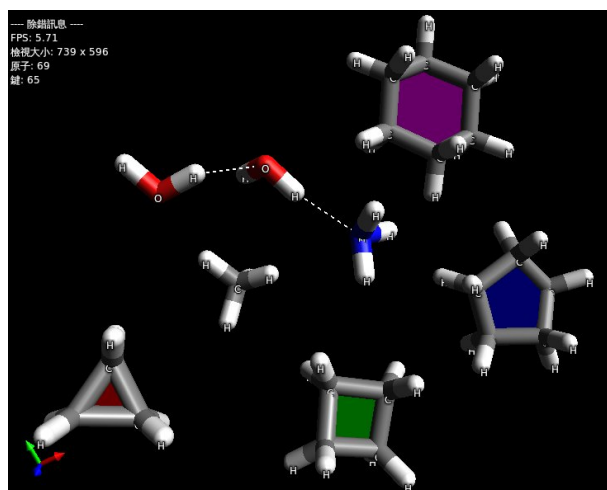
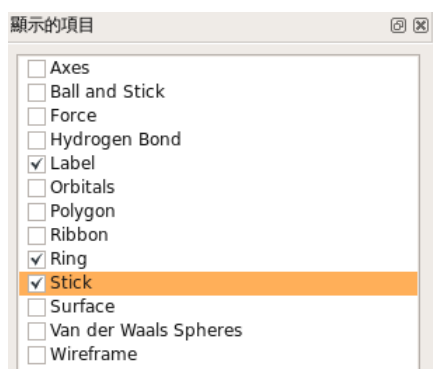


顯示氫鍵的功能更是棒，在畫完水分子及氨分子後，可以選擇移動分子，當顯示項目設定在顯示氫鍵時，只要分子上原子移動到適當的距離時，畫面就會產生氫鍵。這功能實在是太棒了，不但知道哪種高電負度原子與氫結合時會產生氫鍵，也可以知道一個分子可以產生多少氫鍵，更可以用來教何謂分子內氫鍵。(抱歉，這部份笨牛還在趕工，希望可以提供氫鍵教學示範檔)。不過可惜的是，笨牛還沒有摸熟這套軟體，不知道是否可以顯示電子對，如果可以，那對氫鍵形成的教學就太完美了。

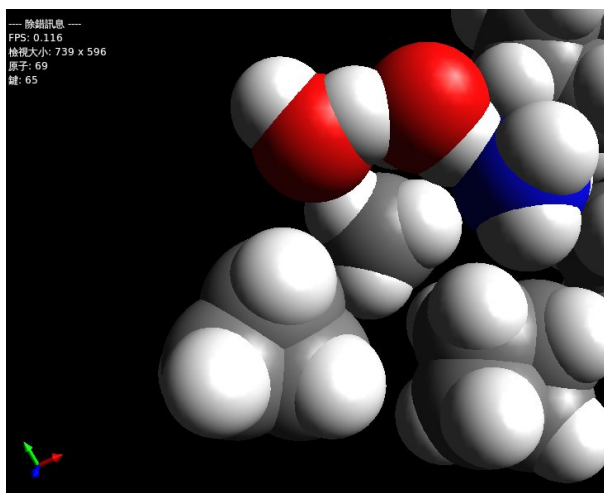
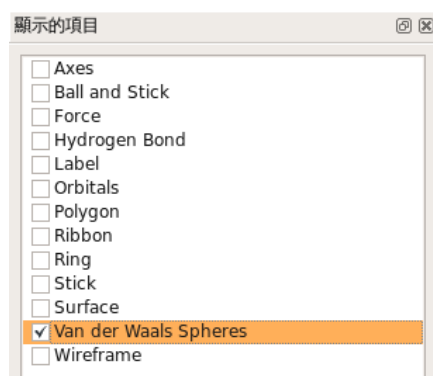


除了 Ball and Stick, Wireframe 外, 當然還有其他的顯示方式.

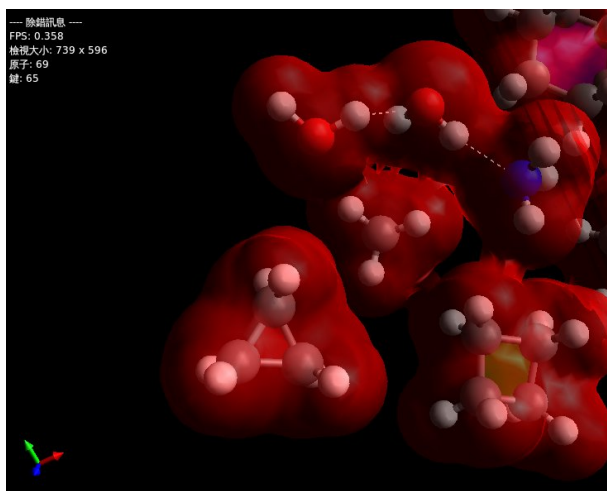
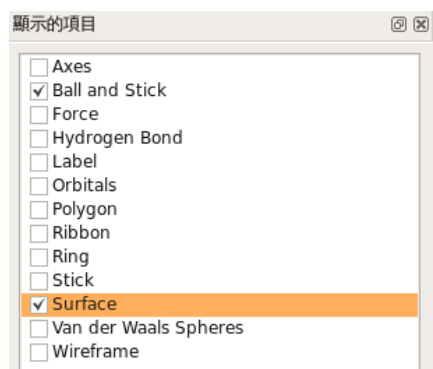
若強調鍵結, 可以取消 Ball and Stick, 改選 Stick (沒有取消 Ball and Stick 也可以)



而 Van der Waals 球狀表示法也是經常出現在教科書及網路上

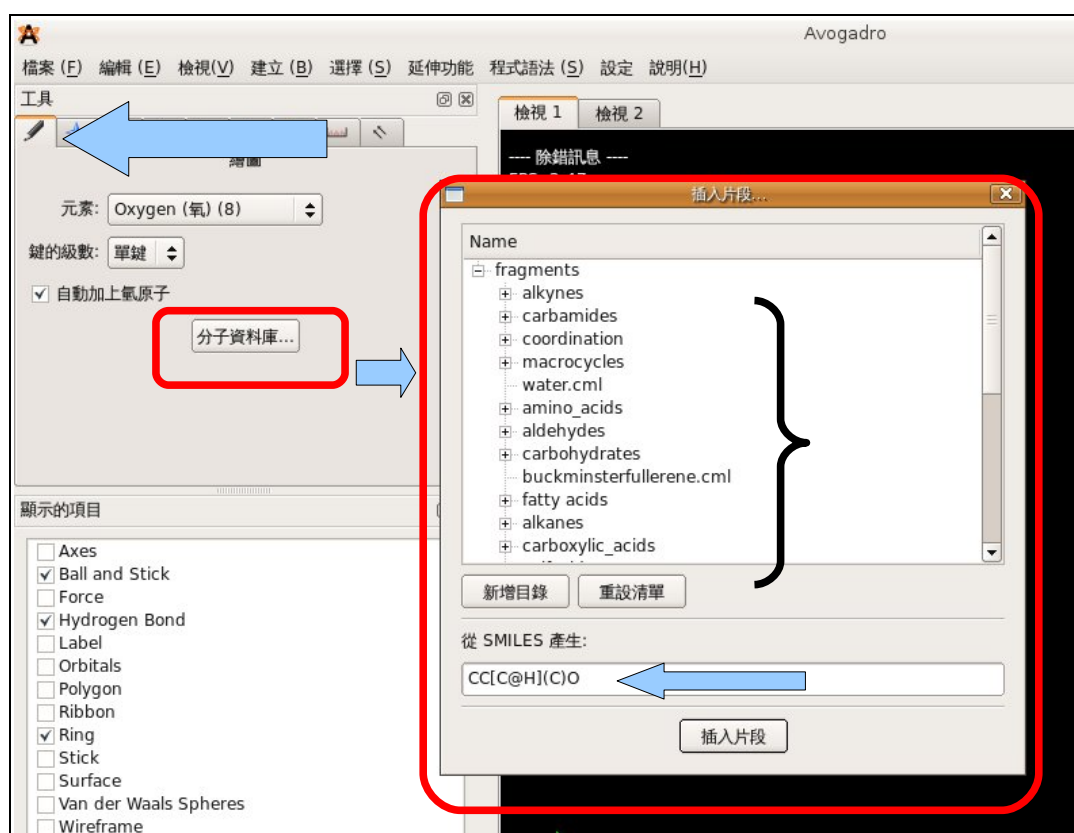


勾選 Ball and Stick, 同時選取 Surface, 可以看到圖中表面是半透明紅色包圍著原子與鍵結.



4-4 由分子資料庫匯入圖形

或許您會問，要畫簡單的分子不用花多少時間，但是要畫個複雜的，是否有現成的可以用？這部份當然有，在繪圖模式中，有個分子資料庫的按鈕，按下後會跳出一個視窗，可以依分選挑選適當的分子插入（但是笨牛試用的結果，這個功能似乎不是很順暢）。眼尖的朋友可能會發現，這個不就是前面介紹的 Chemical Structure 嗎？是的！這裡 Avogadro 用的正是那個資料庫。此外，還可以輸入 SMILES 文字化學式來產生化學結構式，而 SMILES 文字化學式可以在 Wikipedia 介紹化合物的網頁取得，也可以從 Chemical Structures 取得（希望在日後有時間可以介紹這類的文字化學式）



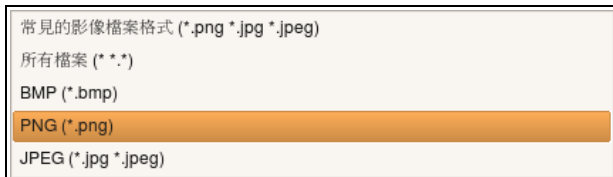
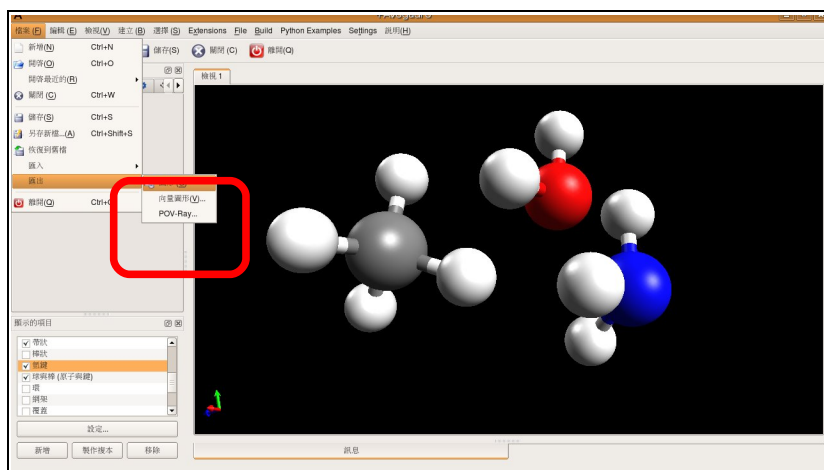
4-5 讀取現成的化學分子檔案

Avogadro 可以讀取數種不同的化學檔案格式，例如 pdb, cml, xyz 等，換句話說，可以把 Avogadro 當作是看圖軟體，好比是笨牛之前介紹過的 pymol。除了看圖，Avogadro 可以匯出高品質的圖片，這是其他軟體目前比不上的，請見下段的說明。

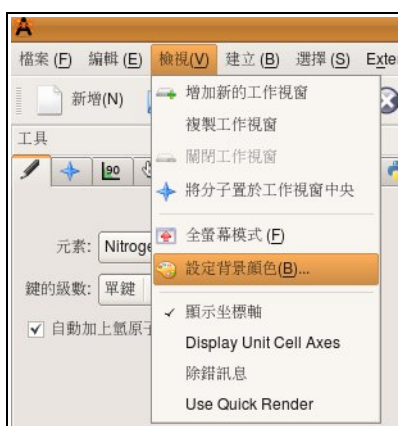
4-6 輸出高品質的分子圖片及其他圖片格式

如果想要把畫出來的分子，或者現成的化學檔案用在文件，簡報，網頁等，簡單的作法是用螢幕拍照程式（例如笨牛常用 Ksnapshot 快照程式），或者使用內建的匯出功能（這功能在 0.8 版時還有問題，但是到了 0.9.4 版就修復了，而且支援高品質圖片輸出）

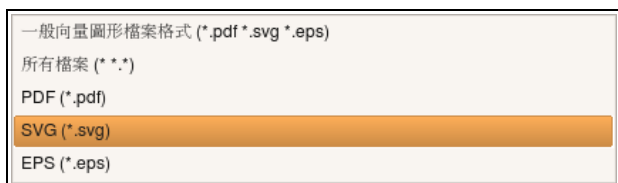
從檔案--> 匯出，可以看到 3 個選項



匯出圖形，可以選常見的 jpeg, png, bmp。這些都是常見的圖片格式，可以用來做簡報，寫文件與網頁，但是可能不適合列印



若覺得背景黑色太難看，可以到 檢視--> 設定背景顏色，把黑色的背景換掉。

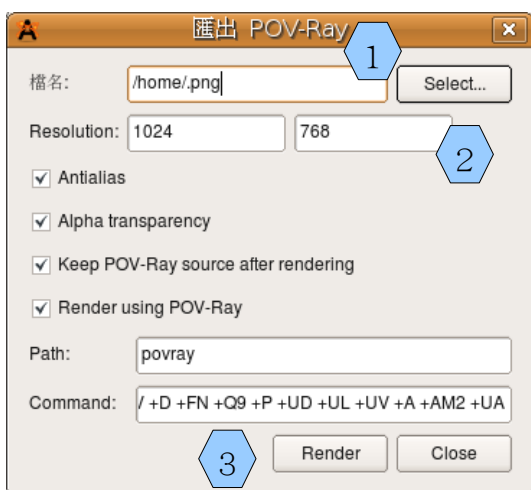


匯出向量圖形.

SVG 是常見的向量圖形格式，EPS 則適合用在列印，若需要很多科學期刊要求作者提供的檔案格式中，EPS 就是其中一個選項。

POV-Ray

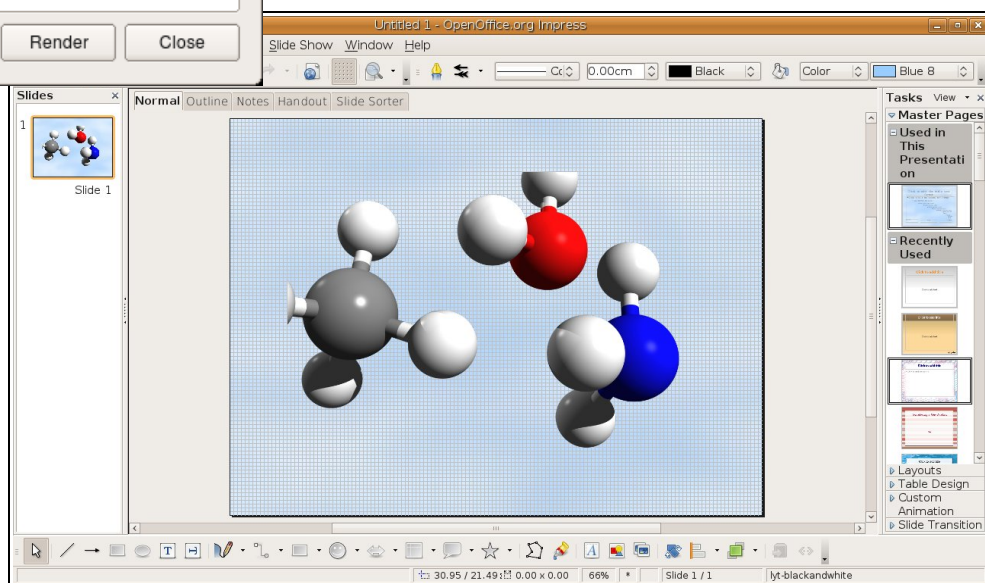
老實說，笨牛不懂 POV-Ray 這東西，從維基百科中 <http://en.wikipedia.org/wiki/Pov-ray> 大略知道圖片可以經由這種技術，強調光和影的效果，讓圖片看起來更棒（所以笨牛說這是高品質圖片是有點誇大）



1. 先選存檔的路徑（這裡的預設路徑怪怪的，一定要調整）

2. 選擇解析度，這裡是 1024*768，這裡看需要自行調整，當然若需要列印，可以用更大的解析度，或者用上面說的 PDF/EPS 檔

3. 按下 Render，就完成



所匯出的圖是 png 檔（就當作跟 jpg 檔很類似的東西吧），而且沒有背景顏色，上面這張是匯出的照片放到簡報軟體的樣子

Avogadro 的功能還有很多，一部分限於笨牛的能力有限（尤其是物化的部份），另一部份是時間不夠，趕著把文件完成，所以無法多寫些內容（例如測量鍵角與鍵長），希望這部份可以儘快完成。

第 5 章 Gchemutils-多合一的化學軟體

授權：GPL，自由授權

費用：免費

支援的作業系統：Linux 類的作業系統

中文介面：有，是我們 Tryneeds 中文化團隊規翻譯的。

安裝方式：見下方說明，未來可能只要添加刪除程式就可以安裝

官方網頁：<http://www.nongnu.org/gchemutils/>（英文）

適合對象：高中生，中學老師，大學生，研究生及大學教職員等

Wekey 說明：<http://wekey.westart.tw/GChemutils>

說明：

有關這套軟體，笨牛在此說明一下故事的過程。很久前笨牛就知道這套軟體，在 gchempaint 官網中看過介紹，覺得很心動，但是笨牛所使用的 Ubuntu Linux 卻還沒有收到套件庫，所以無法從程式添加與移除的功能安裝，必須手動指令安裝，奈何笨牛的功力太淺，沒有成功過，即使最近（2009/02）為了測試這軟體，依然無法使用指令安裝最新版。約在 2008 年 10 月，收到高雄縣中芸國中杜元貴老師的來信，建議笨牛可以測試 Gchempaint 及其系列軟體，功能強大又齊全。2008 年 11 月教育部的孫賜萍老師建議笨牛可以把 Gchempaint 中文化，方便台灣的使用者使用化學軟體，或許是緣份到了，笨牛該工作了，在兩位老師先後的建議下，笨牛到套件庫發現 Gchempaint 已經收到套件庫，所以只要滑鼠點一點就安裝完了，終於不用打指令安裝了（還安裝失敗）。接下來笨牛測試了一下，果然很棒，杜老師強力推薦不是沒有道理，就寫信向原作者說明我們 Tryneeds 團隊（<http://tryneeds.westart.tw/tryneeds/>）想要翻譯 Gchempaint，不久就得到回覆且附上最新版本的翻譯檔。翻譯過程共有十多人參與，因為 Tryneeds 翻譯網路平台，讓有興趣的朋友可以協助翻譯。因為這次化學學科中心的研習課程需要，所以笨牛將大家已經翻譯的部份（約 55%）先取出來交給社群測試同時請花蓮教網蕭維紀（協助學科中心製作研習用的自由光碟），加到作業系統中。

也就是目前的版本（2009-03）是我們測試版本，尚未回傳給原作者（一般自由軟體的翻譯是向作者取得同意及翻譯檔，完成翻譯後把檔案交給作者，才能合併到下一次的新版本，如此一來，無論使用者在哪個國家，只要下載該軟體，翻譯檔就會跟著散佈），預計近日內完成所有的翻譯及校稿後會迅速交給上游，所以朋友們若需要中文版，可以使用我們台灣製作的套件（如教育部的 Ezgo，或是花蓮教網蕭老師製作的 OTG 版本），也可以寫信給笨牛，我會把最新的測試翻譯檔 email 給您。個人相信約在 2009 年 6 月以後，可能就沒有這問題，使用者直接到套件庫安裝即可。

根據官方說明，Gchemutils 是個總稱，包含 5 個子程式

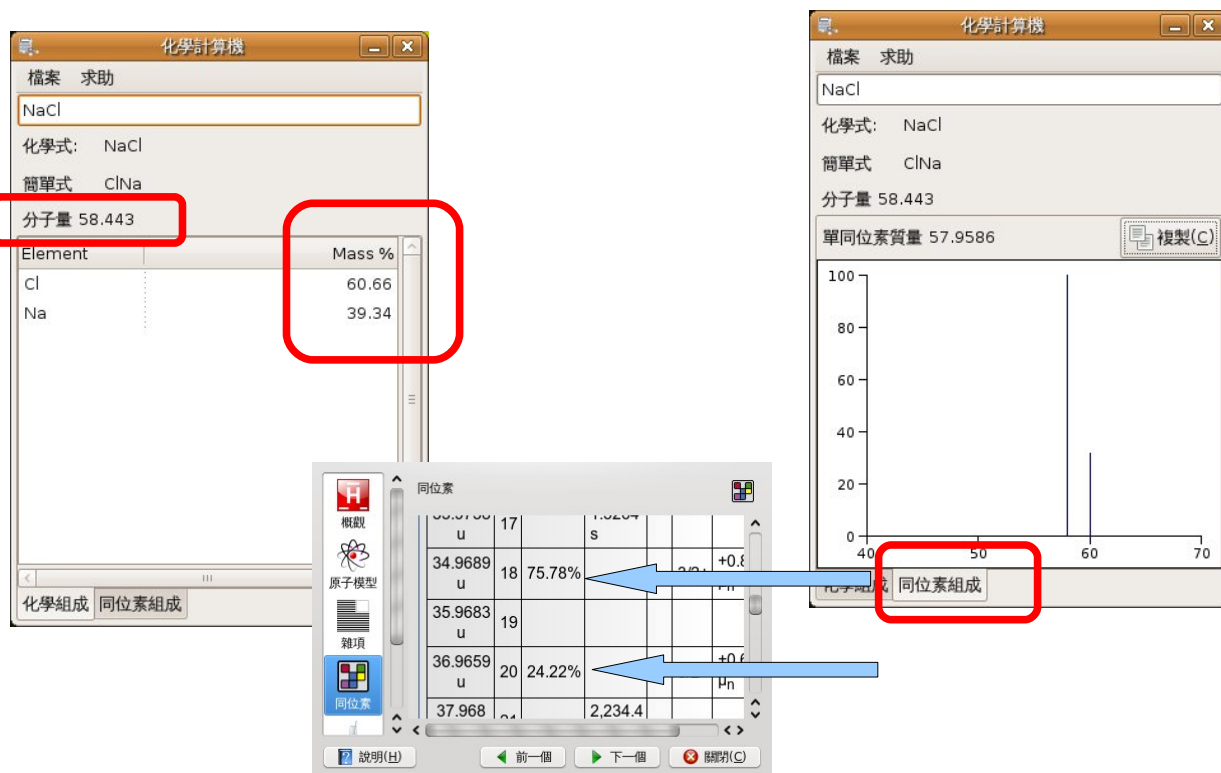
Five programs are available:

- * A 2D chemical editor (GChemPaint).
- * A 3D molecular structure viewer (GChem3DViewer).
- * A Crystal structure viewer (GCrystal).
- * A Chemical calculator (GChemCalc).
- * A periodic table of the elements application (GChemTable).

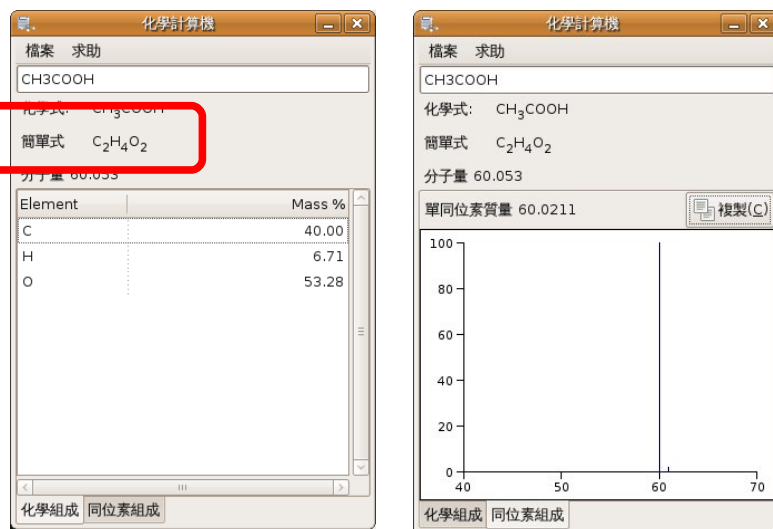
其中括號的部份，是啟動的指令，也是軟體的正規名稱（奇怪的是安裝套件的名稱似乎有所不同，這一點笨牛還在測試中。需要安裝的人可以安裝笨牛給的 gchempaint 的 deb 檔，及從套件庫安裝 gcu-bin 及 gcrystal，這樣 5 個程式都會到齊）。若在應用程式選單中找不到啟動的圖示，可以使用指令終端機，或是 Alt+F2，叫出指令列，打入應用程式的名稱（例如 gchemcalc），就可以啟動該軟體。

5-1 化學計算機 Gchemcalc

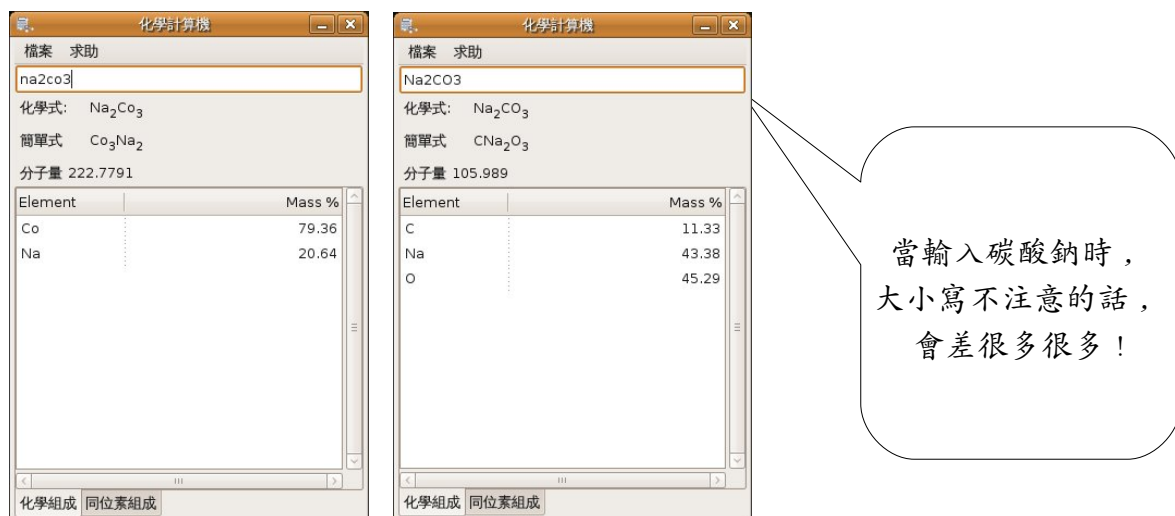
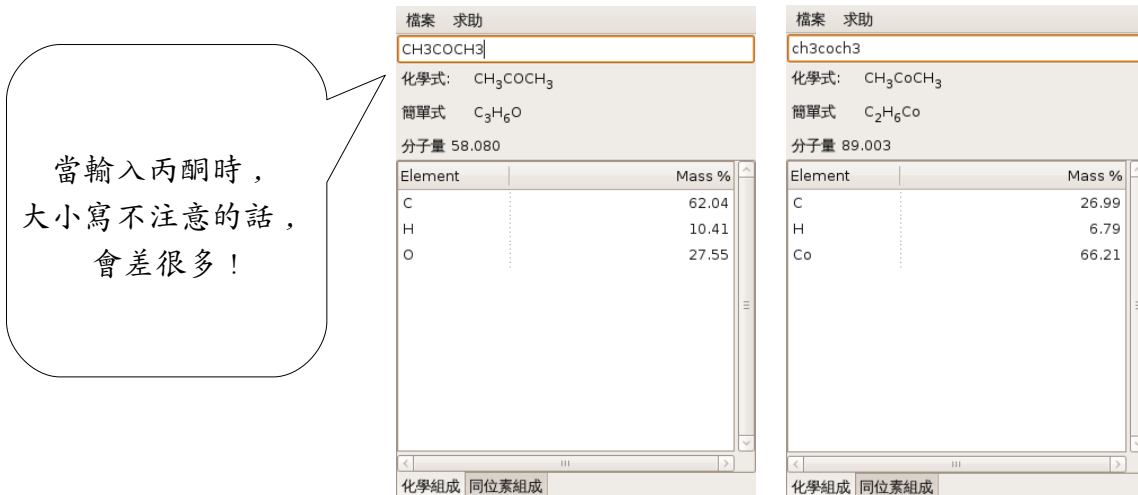
例如我們輸入 NaCl（氯化鈉），就會出現氯與鈉所佔氯化鈉的重量百分比及氯化鈉的分子量。此外，當按下同位素組成，就可以看到此化合物構成中的單同位素質量與同位素組成。從週期表軟體 Kalzium 中我們知道，³⁵Cl 佔 75.78% 而 ³⁷Cl 佔 24.22%（而 ²³Na 是 100%），可是圖中分子量 58 是 100 分，而分子量 60 是約 35 分？一開始笨牛也搞不懂，後來推算才知道是以低分子量的為一百，計算其他的比例，也就是 ³⁵Cl:³⁷Cl = 75.78 : 24.22 = 100 : 31.96。



若輸入有機化學式，有顯示簡單式的功能，可以把碳氫氧的總數算一算。



輸入時請儘量按照元素符號該有的大小寫輸入

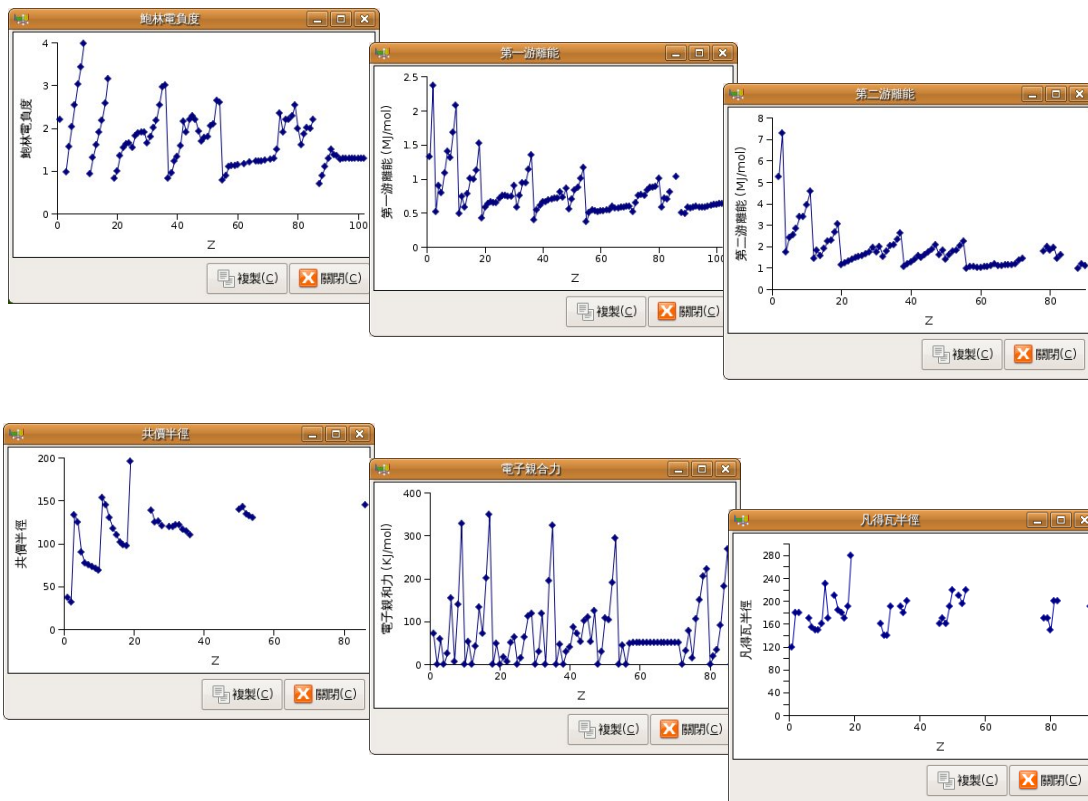


5-2 化學週期表 Gchemtable

相對於Kalzium週期表，Gchemtable有著不同的風格，一樣可以依照屬性設定顏色，也有多種基本資料如熔沸點，電子組態，電子親和力，電負度，游離能等資料。

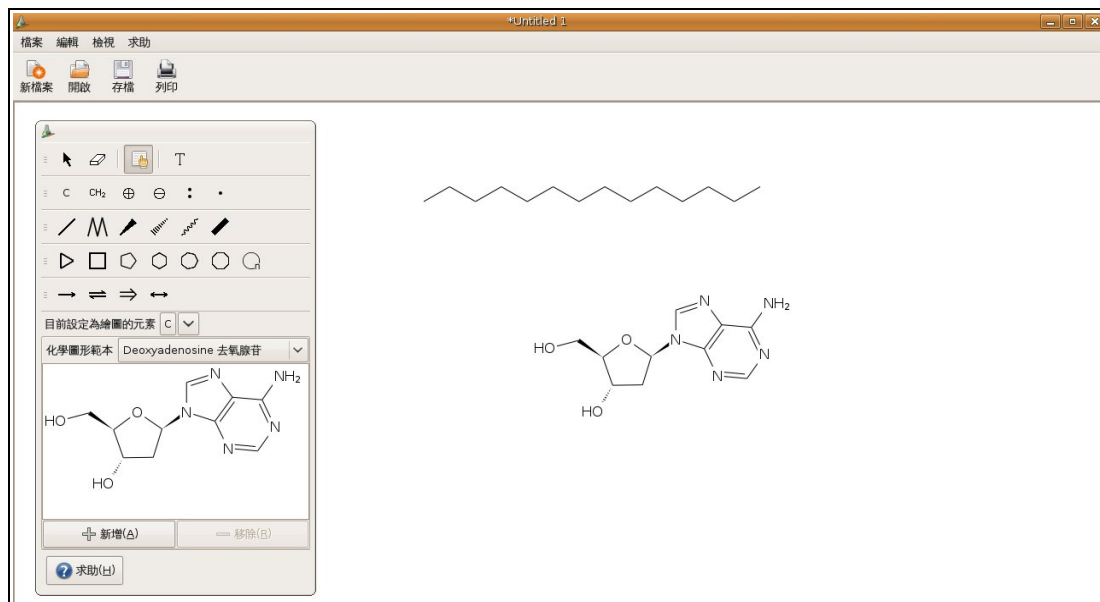


而且有趨勢圖，比較容易觀察出規則，而不用死背。



5-3 平面化學繪圖軟體 Gchempaint

Gchempaint 雖然是平面分子畫圖軟體，但是其整合的功能卻是相當驚人，現在就聽笨牛慢慢道來



基本繪圖功能

這部份與多數化學軟體相似，有畫圖，擦拭，各種鍵，箭頭等功能。



H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh		
Lanthanides 鐳系元素		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
Actinides 錒族元素		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

圖形範本

這功能相當的棒，而且我們團隊已經以保留英文加上中文的方式把範本的化合物翻譯完了，對於高中生及大學低年級的學生，可以只看中文，對於習慣用英文名的研究生或是教授可以看看英文名。

範本功能

目前設定為繪圖的元素: o

化學圖形範本: Deoxyadenosine 去氧腺苷

新增(A) 移除(B)

求助(H)

- Aromatic hydrocarbons 芳香烴
 - Anthracene 蒽
 - Azulene 奧/甘菊藍
 - Benzene 苯**
 - Naphtalene 萘
 - Phenanthrene 菲
 - Pyrene 焦油腦/康/菲甲菲
- Nucleic bases 鹼基/核鹼基
 - Adenine 腺嘌呤
 - Cytosine 胞嘧啶
 - Guanine 鳥嘌呤**
 - Thymine 胸嘧啶
 - Uracil 尿嘧啶
- Saccharides 醣類
 - α-D-deoxyribofuranose 去氧夫喃糖
 - α-D-fructofuranose 果夫喃糖
 - α-D-galactopyranose 半乳呱喃糖
 - α-D-glucopyranose 葡萄呱喃糖**
 - α-D-ribofuranose 核夫喃糖
 - β-D-deoxyribofuranose 去氧夫喃糖
 - β-D-fructofuranose 果夫喃糖
 - β-D-galactopyranose 半乳呱喃糖
 - β-D-glucopyranose 葡萄呱喃糖
 - β-D-ribofuranose 核夫喃糖
- Amino acids 胺基酸
 - Alanine 丙胺酸
 - Arginine 精胺酸
 - Asparagine 天門冬醯胺**
 - Aspartic acid 天門冬酸
 - Cysteine 半胱胺酸
 - Glutamic acid 麩胺酸
 - Glutamine 麩胺酸
 - Glycine 甘胺酸
 - Histidine 組胺酸
 - Isoleucine 異白胺酸
 - Leucine 白胺酸
 - Lysine 離胺酸
 - Methionine 甲硫胺酸
 - Phenylalanine 苯丙胺酸
 - Proline 脯胺酸
 - Serine 絲胺酸
 - Threonine 蘇胺酸
 - Tryptophan 色胺酸
 - Tyrosine 酪胺酸
 - Valine 纈胺酸

點選範本後可以預覽

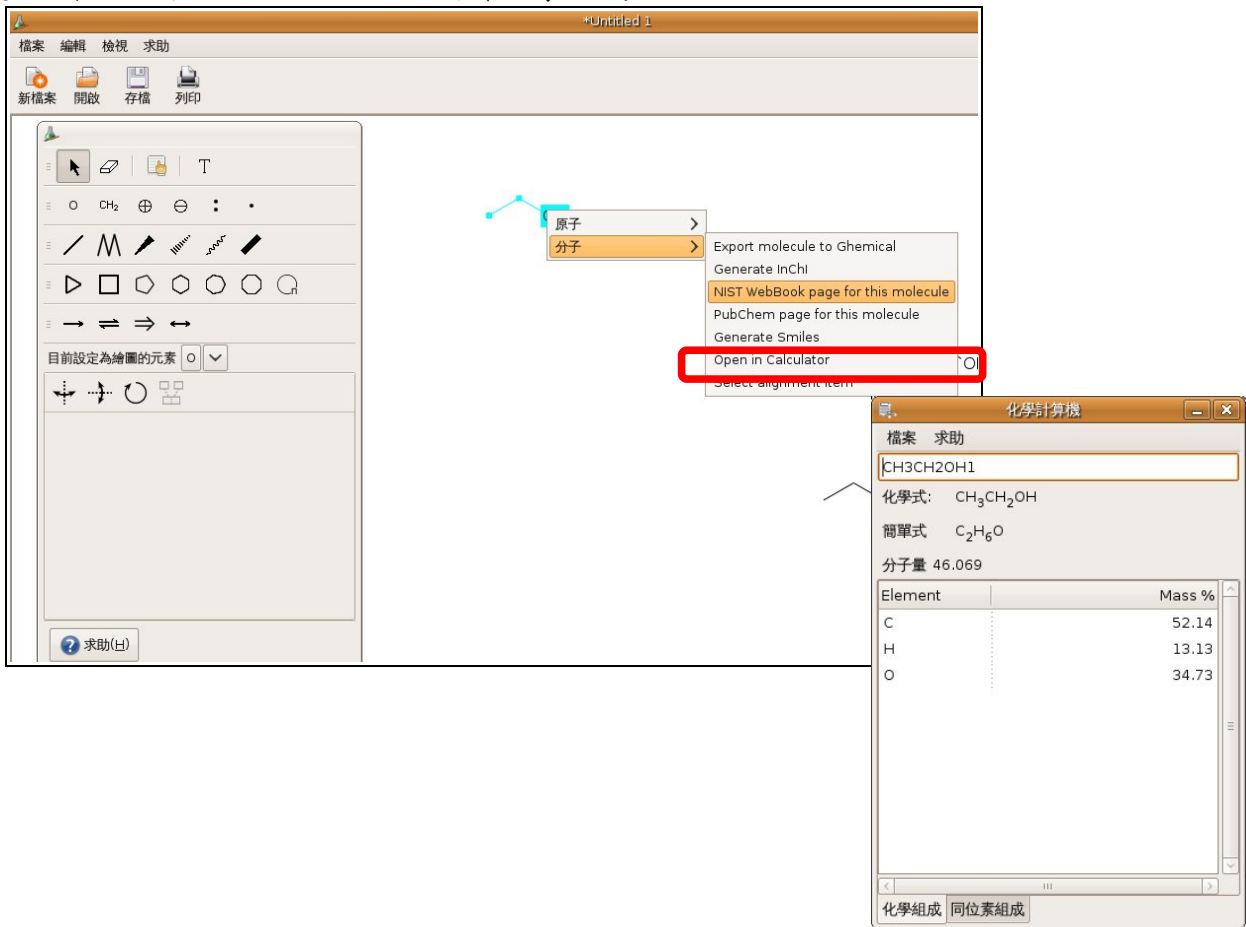
確定後加入圖形

Ready

[Mozilla Firefox] 2009年中學化學生物.odt - OpenOff... for_snapshot - 檔案瀏覽器

整合功能 1: 接到 gchemcalc

例如畫了一個乙醇分子，用滑鼠右鍵叫出選單，選分子 > Open in Calculator 就會自動把畫出來的分子丟到 Gchemcalc，計算化學組成。

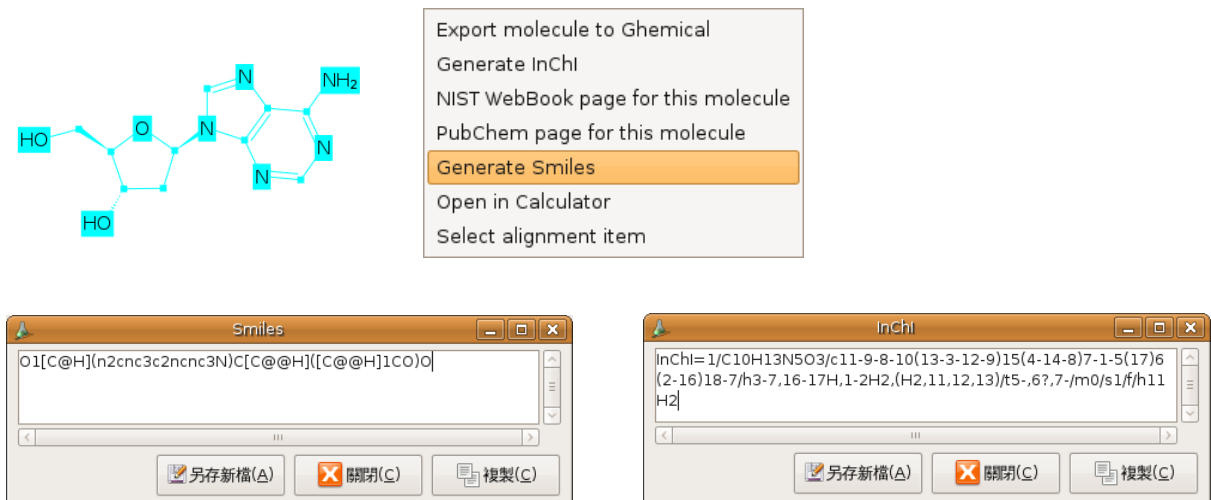


The screenshot shows the GChemCalc interface. A right-click context menu is open over a molecule, with the '分子' (Molecule) option selected. The 'Open in Calculator' option is highlighted with a red box. A secondary window titled '化學計算機' (Chemical Calculator) is open, displaying the chemical formula CH3CH2OH and its composition:

Element	Mass %
C	52.14
H	13.13
O	34.73

整合功能 2: 輸出文字化學式 (SMILES 及 InChI)

例如選擇範本中的 Deoxyadenosine，按右鍵出現選單，選擇 Generate Smiles 或 InChI，就會出現文字化學式 (如下圖)，可以貼在網路上，其他人只要複製貼上文字化學式在適當的化學軟體，就會得到相同的結構式



The screenshot shows the chemical structure of Deoxyadenosine. A right-click context menu is open, with the 'Generate Smiles' option selected. Below the structure, two windows are shown:

Smiles window:

```
O1[C@H](n2nc3c2nc3N)C[C@@H]([C@@H]1CO)O
```

InChI window:

```
InChI=1/C10H13N5O3/c11-9-8-10(13-3-12-9)15(4-14-8)7-1-5(17)6(2-16)18-7/h3-7,16-17H,1-2H2,(H2,11,12,13)/t5-.6?,7-/m0/s1/f/h11H2
```

整合功能 3: 畫出分子, 去 NIST 把資料找出來

有人 NIST 翻譯成美國國家標準局, 其中有名的是線上化學資料庫 [NIST Chemistry WebBook](#) 2002-2003 年笨牛當助教時常用來查詢化學資料。

例如畫出乙醇, 在右鍵選單叫出 [NIST WebBook page for this molecule](#) 或者 [PubChem page for this molecule](#), 軟體就會自動在瀏覽器找出這網頁的這個化合物。感謝杜老師告知此功能, 這實在是非常神奇。

我親愛的朋友們, 笨牛看到了軟體應用的潛力, 扣掉研究人員不說, 這套軟體的可以讓高中生使用, 等他們進到大學生修化學課時, 就可以接到 NIST Chemistry WebBook, 查化學基本資料, 到研究所時, 可以接到 PubChem 查研究文獻。

The image illustrates a workflow for finding chemical data. It starts with a chemical drawing application where a right-click context menu is shown over a drawn ethanol molecule. The menu options include 'Export molecule to Chemical', 'Generate InChI', 'NIST WebBook page for this molecule', 'PubChem page for this molecule', 'Generate SMILES', 'Open in Calculator', and 'Select alignment item'. The 'NIST WebBook page for this molecule' and 'PubChem page for this molecule' options are highlighted with a red box. Below this, two browser windows are shown. The first window displays the NIST Chemistry WebBook page for Ethanol, showing its formula (C₂H₆O), molecular weight (46.0684), and IUPAC Standard InChI. The second window shows a PubChem search result for Ethanol, but it displays a red error message: 'The following terms were not found: InChI=1, c1-2-3. Quoted phrase not found. See Details. No items found.' A speech bubble points to this error message with the text: '奇怪, PubChem 沒有酒精? 這問問題已經反應給作者, 作者說可能是 InCHI 版本的不同, 會儘快修改'.

第 6 章 Protein Data Bank 生化分子資料庫

6-1 有關 Protein Data Bank

授權：算是 public domain (公共財)，授權聲明

費用：免費

支援的作業系統：皆可

中文介面：無

安裝方式：線上瀏覽，也可下載分子用化學看圖軟體瀏覽

網頁：<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do> (英文)

Wekey 說明：[http://wekey.westart.tw/Protein_Data_Bank_\(PDB\)](http://wekey.westart.tw/Protein_Data_Bank_(PDB))

說明：

Protein Data Bank 是學術研究用的資料庫，收錄了許多生物分子的立體結構，檔案格式是 pdb，該資料庫是 public domain。原則上不適合用在大學低年級學生及高中生使用，但是我們可以只取需要的部份，例如 DNA 雙股螺旋非常適合在高中生物課及大學生化的課程。笨牛已經下載數個 PDB 檔以方便教學，若有興趣的朋友們可以自行搜尋下載需要的生物分子立體圖，例如可以輸入愛滋病“AIDS”，會得到很多資料，而輸入肺癌“lung cancer”相對得到的資料比較少。再次強調，這資料庫是作生化學相關領域研究用，即使如此，並非每個生化相關領域的研究人員都會用到這個資料庫（例如笨牛在讀研究所時，因為研究方向不同，不太會用到 PDB 資料庫的東西）。

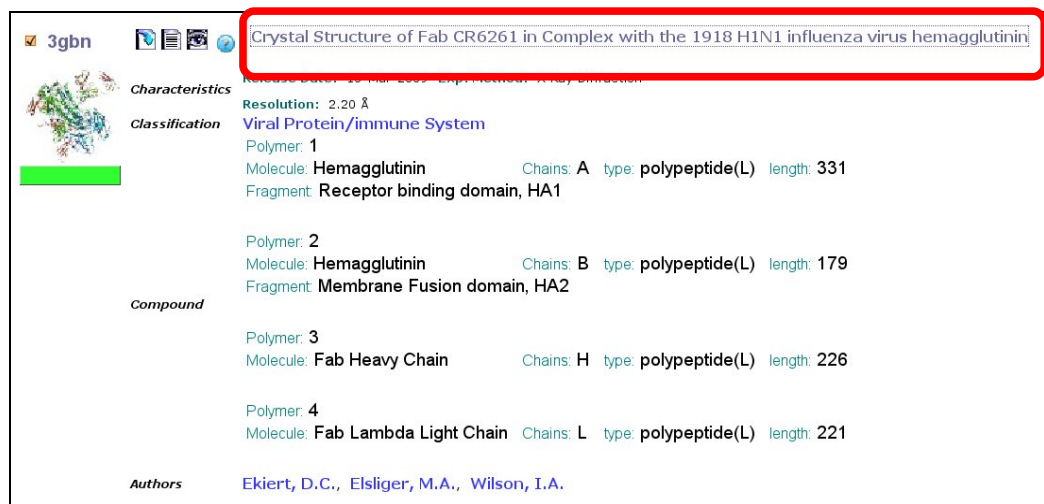
這是他們提供的動態介紹使用 Jmol 線上觀看分子的立體圖

http://www.rcsb.org/robohelp_f/quickjmol.swf

6-2 線上使用簡介



例如最近墨西哥爆發流感，專家說是 H1N1 型的感冒病毒，來個機會教學。首先在搜尋欄打入 "H1N1 virus"，然後按下旁邊的 Site Search，會出現多筆資料。



例如血液凝集素，有該蛋白的立體結構圖，組成的次單位與長度，底下則列出作者，點入連結可以看到詳細的介紹，

點這裏，可以下載該分子的檔案，可以用其他化學看圖軟體開啓。
建議的化學看圖軟體如 pymol, Avogadro 等。

點這裏，可以看到該檔案的文字型式，如各原子的空間座標

3gbn [Learn more: \[M\] \[M\] \[M\] \[M\] \[M\] \[M\]](#)
DOI 10.2210/pdb3gbn/pdb

Red - Derived Information

Title	Crystal Structure of Fab CR6261 in Complex with the 1918 H1N1 influenza virus hemagglutinin
Authors	Ekiert, D.C., Elsiger, M.A., Wilson, I.A.
Primary Citation	Ekiert, D.C., Bhabha, G., Elsiger, M.A., Friesen, R.H., Jongeneelen, M., Throsby, M., Goudsmit, J., Wilson, I.A. (2009) Antibody recognition of a highly conserved influenza virus epitope. <i>Science</i> 324 : 246-251 [Abstract] PubMed
History	Deposition 2009-02-20 Release 2009-03-10 Last Modified (REVDAT) 2009-04-21
Experimental Method	Type X-RAY DIFFRACTION Data
Parameters	Resolution[Å] R-Value R-Free Space Group 2.20 0.207 (obs.) 0.241 1 2 ₁ 3

Images and Visualization

Biological Molecule

Display Options

- Jmol
- KING
- WebMol
- MBT SimpleViewer*
- MBT Protein Workshop
- QuickPDB
- All Images

* Capable of displaying biological molecules.

這裏可以看到很多詳細的資訊，不過很多東西都太專業了，笨牛也看不懂，沒關係那是相關領域的研究人員才會用到，這裏我們只要看立體結構就好。

畫面右方有個縮圖，在 display Options 下方有一些連結，是可以在線上看這個分子的方法。

RCSB **PDB** PROTEIN DATA BANK

A MEMBER OF THE **PDDB** MyPDB: Login | Register

An Information Portal to Biological Macromolecular Structures

As of Tuesday May 05, 2009 there are 57424 Structures | PDB Statistics

CONTACT US | FEEDBACK | HELP | PRINT

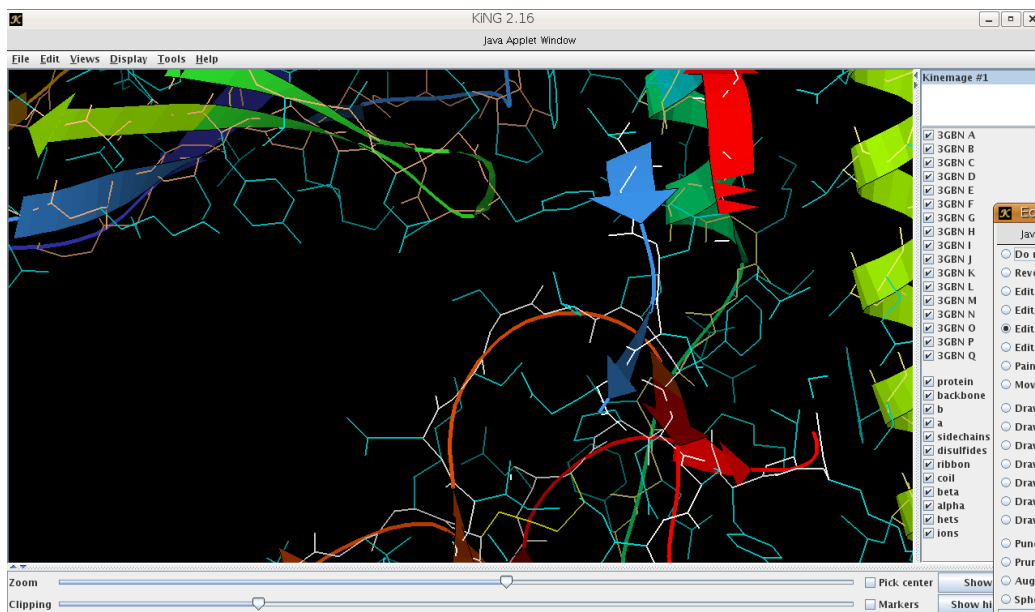
PDB ID or keyword Author Site Search Advanced Search

這個圖是點下 Jmol 後所顯示的樣子，Jmol 是自由軟體，可以嵌在網頁中。

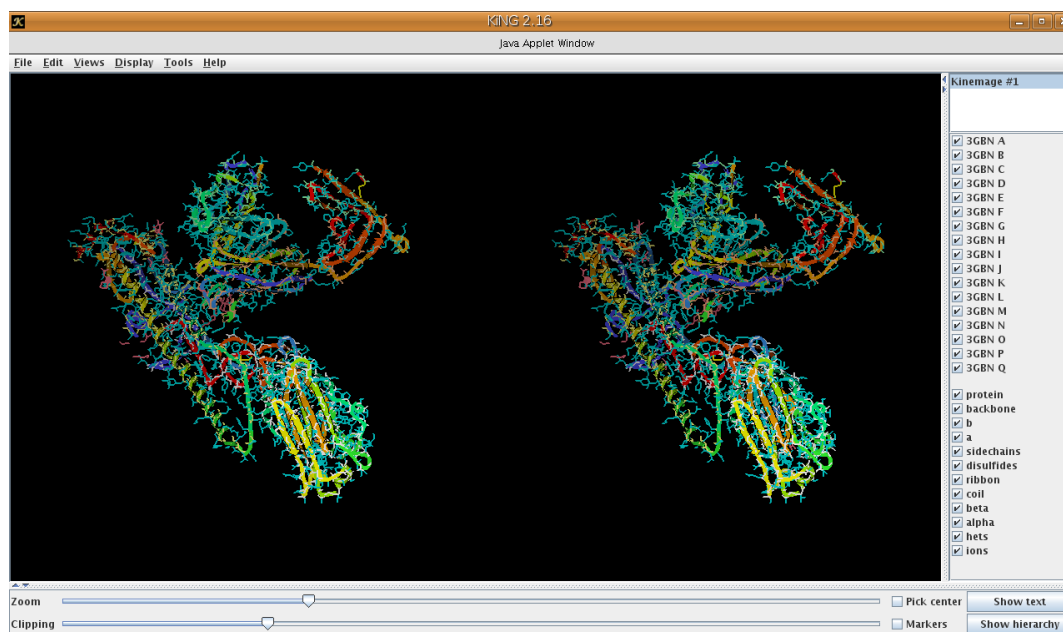
剛點入時可能要耐心等候資料的下載（可能要等數十秒），然後可能會跳出一個視窗詢問是否同意執行 java，按下同意後就會跳出圖形。可以用滑鼠在畫面旋轉分子，從不同的角度觀察。



若是選擇用 KiNG 看立體分子，在等待數十秒（等下載）後，會跳出一個視窗，同樣可以旋轉，放大縮小，但是 KiNG 提供更多功能（在此不多說，有些功能跟生化研究有關，這笨牛也不懂）



用 kiNG 還可以把分子設成立體視覺的樣子如下圖，根據官方手冊的說法，可以把眼睛調成立體視覺，就可以看到這分子的立體圖。



KiNG 是由美國杜克大學 Richardson 實驗室所創作的開源軟體，除了 KiNG，還有很多生物化學研究的軟體，不但公佈原始碼，還支援 Windows，蘋果，Linux 等系統，有興趣的朋友可以參考

請見 <http://kinemage.biochem.duke.edu/index.php>

第 7 章 原子與分子軌域教學軟體 (Learning Atomic and Molecular Orbitals)

7-1 有關 Falstad's java applets

授權：作者 Paul Falstad 有公開原始碼，可以免費取得，但是並非自由軟體

費用：免費

支援的作業系統：線上使用（多種作業系統皆可）

中文介面：沒有

安裝方式：線上使用或是下載使用，不需要安裝（但是可能需要安裝 Java）

官方網頁：(英文)

適合對象：高中生，中學老師，大學生，研究生及大學教職員等

Wekey 說明：http://wekey.westart.tw/Falstad's_Java_Applets

說明：

Special thanks to Paul Falstad

One Dollar, the author of the document sincerely appreciates Paul Falstad who creatives so many wonderful java applets for education. One dollar has got the permission to use the screen shots of java applets for education purposes. Paul's java applets are really useful in learning some abstract concepts in in math, physics, and engineering. In this chapter, One Dollar is going to introduce atomic and molecular orbitals by using Falstad's java applets. Besides orbital applets, he has more interesting applets, for example, dispersion applet is good to explain the periods of tides (factors from earth, moon and sun); and 2-D vector Fields applet visualizes the concepts of field theory or black holes.

If you want to know more, please check these website:

Falstad's homepage: <http://www.falstad.com/index.html>

His java applets for education: <http://www.falstad.com/mathphysics.html#qm>






雖然作者有公開原始碼，可以讓人免費下載或是線上使用，笨牛不確定是否為自由軟體，所以先寫信問過作者，作者同意笨牛可以使用及散佈 java 教學及電腦擷取的畫面。

這裡笨牛要說明一下，2009 年 3 用到高雄中學化學學科中心研習時，有化學老師問到有沒有軌域的教學軟體，感受到這方面的需求。其實笨牛已經找很久，就是沒有找到簡單好用又是自由軟體的，有幾個軟體都是指令式，只適合化學研究所使用，不適合在高中及大學的課程。後來發現幾個不錯的，但是可能非自由軟體，不過我們的目的是方便教學，所以先向作者取得同意。至於自由軟體有沒有機會發展教單好用的化學軌與教學軟體，就看教育部國科會有沒有這企圖，或是軟體志工們有沒有興趣寫這程式。







這幾張圖取自 Falstad 的網頁，有許多有用的教育軟體

<http://www.falstad.com/mathphysics.html#qm>



Oscillations and Waves

-  **Ripple Tank (2-D Waves) Applet**
Ripple tank simulation that demonstrates wave motion, interference, diffraction, refraction.
-  **2-D Waves Applet**
Demonstration of wave motion in 2-D.
-  **3-D Waves Applet**
Demonstration of wave motion in 3-D.
-  **Coupled Oscillations Applet**
Demonstration of longitudinal wave motion in oscillators connected by springs.
-  **Dispersion Applet** NSW
Dispersion and group velocity.





Acoustics

-  **Loaded String Applet**
Simulation of wave motion of a string.
-  **Rectangular Membrane Waves Applet**
Vibrational modes in a 2-d membrane.
-  **Circular Membrane Waves Applet**
Vibrational modes in a 2-d circular membrane (drum head).
-  **Bar Waves Applet**
Bending waves in a bar.
-  **Box Modes Applet**
Acoustic standing waves in a 3-d box.
-  **Acoustic Interference Applet**
Generates audio interference between your speakers.

Signal Processing

-  **Fourier Series Applet**
Frequency analysis of periodic functions.
-  **Digital Filters**
Filters digital signals and plays the output on your speakers.









Electricity and Magnetism: Statics

-  **2-D Electrostatics Applet**
Demonstrates static electric fields and steady-state current distributions.
-  **2-D Electrostatic Fields Applet**
Demonstrates electric fields in various 2-D situations; also shows Gauss's law.
-  **3-D Electrostatic Fields Applet**
Demonstrates electric fields in various 3-D situations.
-  **3-D Magnetostatic Fields Applet**
Demonstrates magnetic fields in various situations.



Electrodynamics

-  **2-D Electrodynamics Applet (TE)**
Demonstrates electromagnetic radiation.
-  **2-D Electrodynamics Applet (TM)**
Demonstrates electromagnetic radiation, induction, and magnetostatics.
-  **Analog Circuit Simulator Applet**
Demonstrates various electronic circuits.
-  **Cavity Modes Applet**
Electromagnetic waves in a 3-d rectangular cavity.
-  **Waveguide Modes Applet**
Electromagnetic waves in a waveguide.
-  **Antenna Applet**
Generates antenna radiation patterns.
-  **Fresnel Diffraction Applet**
Generates Fresnel diffraction patterns.



Quantum Mechanics

-  **Hydrogen Atom Applet**
Shows the orbitals (wave functions) of the hydrogen atom.
-  **Molecular Orbitals Applet**
Shows the orbitals (wave functions) of the hydrogen molecular ion.
-  **1-D Quantum Mechanics Applet**
Single-particle quantum mechanics states in one dimension.
-  **1-D Quantum Crystal Applet**
Periodic potentials in one dimension.
-  **2-D Quantum Crystal Applet**
Periodic potentials in two dimensions.
-  **1-D Quantum Transitions Applet**
Radiative transitions (absorption and stimulated emission) in one dimension.
-  **Atomic Dipole Transitions Applet**
Radiative transitions (absorption and stimulated emission) in atoms.
-  **2-D Rectangular Square Well Applet**
Rectangular square well (particle in a box) in two dimensions.



Linear Algebra

-  **Dot Product Applet**
Demonstrates the dot product or scalar product of two vectors.
-  **Matrix Applet**
Demonstrates 2-d transformations using a matrix.

Vector Calculus

-  **2-D Vector Fields Applet**
Demonstrates various properties of vector fields, including divergence and curl, etc.
-  **3-D Vector Fields Applet**
Demonstrates vector fields in 3 dimensions. Includes the Lorenz Attractor and Rossler A.

Thermodynamics

-  **Gas Molecules Simulation Applet**
Demonstrates the kinetic theory of gases.
-  **Thermal Camera Pictures**
Some sample pictures taken with a thermal (infrared) camera. (This is not an applet but

一定要去玩玩看，真的很有趣，抽象的概念圖形化之後就容易懂了。

7-2 氫原子軌域教學 (Atomic Orbitals)

在開始之前，先來快速看看量子數有哪些東西。

主量子數 n (principal quantum number)，

角量子數 l (Azimuthal quantum number/orbital angular momentum quantum number)

磁量子數 m (magnetic quantum number)

第四個先不談。

	$l = 0$	1	2	3	4	...
$n = 1$	$m_l = 0$					
2	0	-1, 0, 1				
3	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2			
4	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3		
5	0	-1, 0, 1	-2, -1, 0, 1, 2	-3, -2, -1, 0, 1, 2, 3	-4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4	
...

取自 Wikipedia: http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbitals

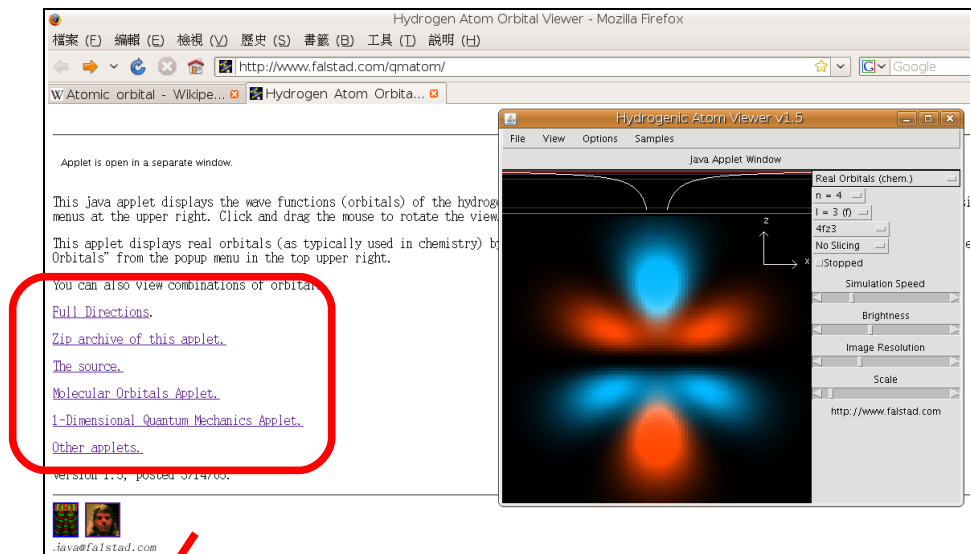
	s ($l=0$)	p ($l=1$)			d ($l=2$)				f ($l=3$)							
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=\pm 3$		
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_z(x^2-y^2)$	$f_x(x^2-3y^2)$	$f_y(3x^2-y^2)$
n=1	•															
n=2	•															
n=3	•															
n=4																
n=5									
n=6				
n=7	

取自 Wikipedia: http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbitals

現在就利用上面的表格來解釋如何利用 Falstad's java applets 在原子軌域的教學。

請見 <http://www.falstad.com/qmatom/>

一進入網頁會看到這樣的場景，會自動出現一個小視窗顯示原子軌域，可以直接用來教學。



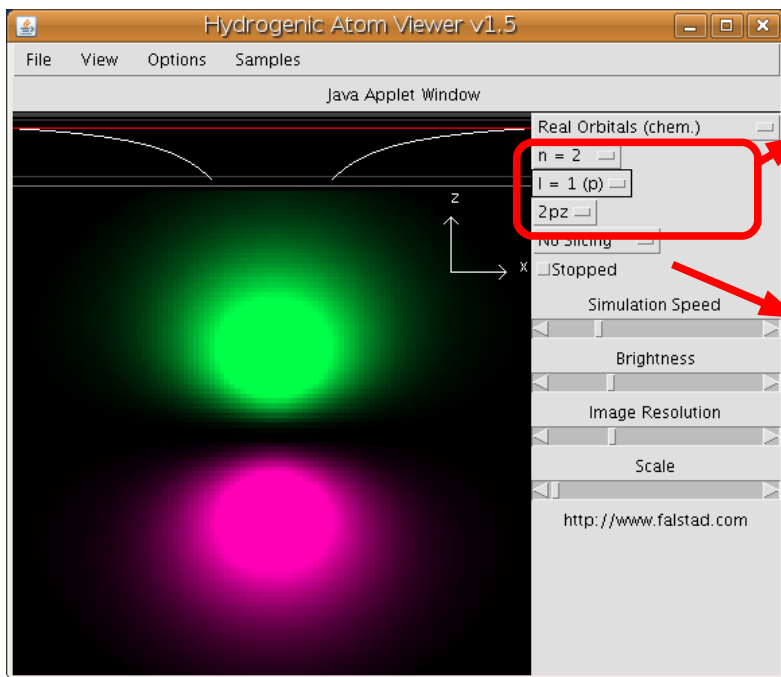
[Full Directions.](#)
[Zip archive of this applet.](#)
[The source.](#)
[Molecular Orbitals Applet.](#)
[1-Dimensional Quantum Mechanics Applet.](#)
[Other applets.](#)
Version 1.5, posted 3/14/05.

Full Directions: 使用說明 (英文)
Zip archive of this applet: 下載本軟體 (zip 壓縮格式). 若網路不方便, 需要先下載時, 就進入這連結

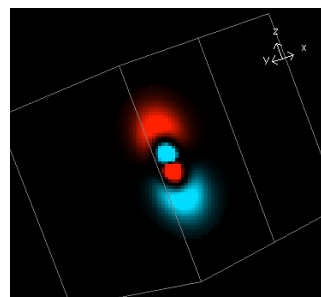
點入後會下載一個壓縮檔 qmatom.zip



解壓縮後只要滑鼠雙擊 index.html 檔就會出現上面的網頁與原子軌域教學視窗



1. 依序選擇主量子數，角量子數，磁量子數，就會自動跳出該軌域的圖
2. 可以用滑鼠翻轉軌域，方便觀察其立體結構



可以選擇 slicing，從 x（或者 y, z）方向來切片，可以看到截面圖，滑鼠可以移動截面，更能了解軌域的立體結構。

其餘的調整亮度，自動旋轉等功能不是那麼重要，時間關係，留到下一版再補齊。

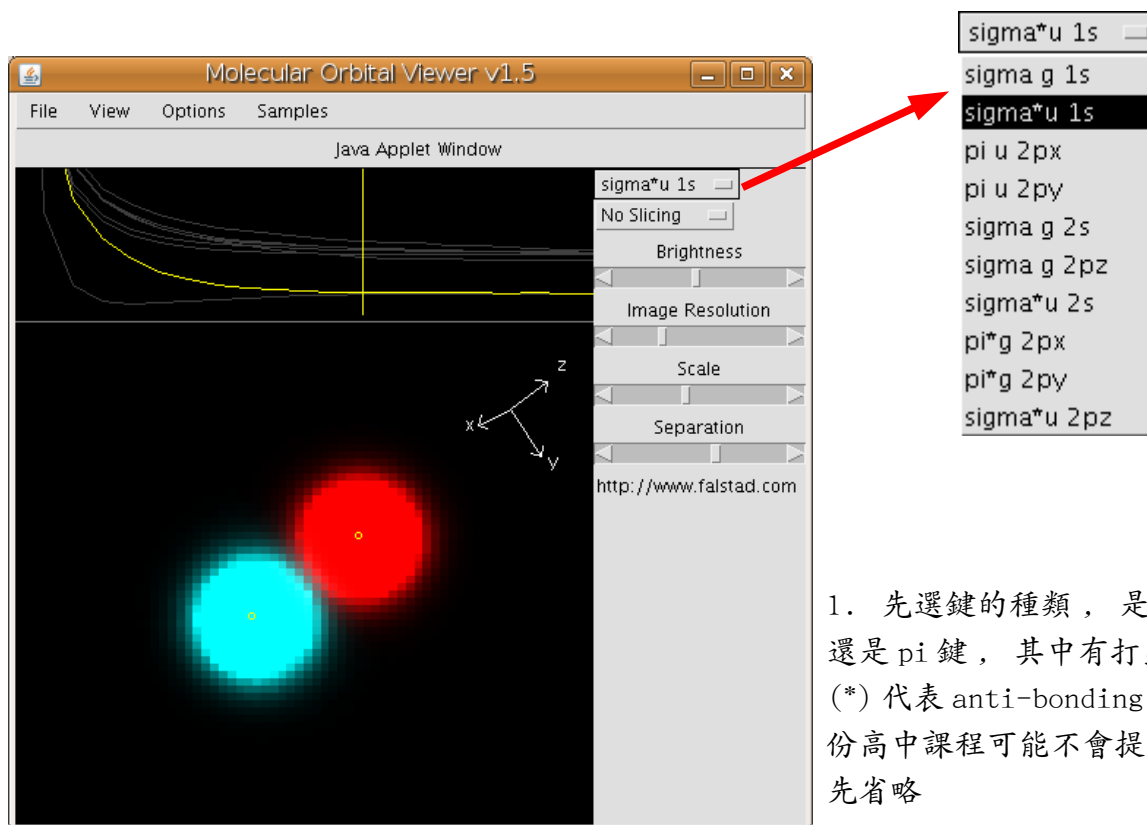
這部份的應用，除了學習幾個量子數的規則外（例如 $n=1$ 時，不可能出現 f 軌域），同時知道其形狀，因為是互動的教學，所以會比單向的教學來的有趣，讓空間概念比較需要加強的學生有多個工具，多幾次的練習機會。

其實作者還發展許多功能，例如選單中 View/Radial distribution 就可以看到分佈的機率與半徑的關係圖。只是笨牛這部份學的很差，大二修過物化 (physical chemistry)，我們都自嘲是在修 fog chemistry，猶如身陷五里霧中。所以這方面需要在加強，當然化學老師們比較專業，如何利用這個 java applet 來進行教學就看老師們的功力了。

7-3 分子軌域教學 (Molecular Orbitals)

請見 <http://www.falstad.com/qmno/>

這是分子軌域也是經典，想當年，笨牛高中化學還可以，但是到了大學化學的 bonding and anti-bonding，就又身陷五里霧中。沒關係，我們現在來看看這個教學。



1. 先選鍵的種類，是 sigma 還是 pi 鍵，其中有打星號 (*) 代表 anti-bonding，這部份高中課程可能不會提到，就先省略

2. 可以用滑鼠旋轉軌域，這樣可以觀察立體結構。

若要下載分子軌域教學，方法剛上面的一樣，就不多說了。分子軌域在高中提到的不多，所以這個教學反而適合在大學的化學課程。

其他相關資源

<http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>

這個也是不錯的軌域繪圖軟體，適合在 Windows 上面跑，笨牛曾經使用 wine 來跑這個 exe 檔，效果不錯。但是這不是自由軟體，也沒有開原，所以有興趣的朋友請自行測試，笨牛以後有時間再來介紹

其實笨牛還在尋找有提到混成軌域的教學，當然是自由授權的優先，若朋友們知道有這種東西，可以合法免費取得時，請告訴笨牛，感謝。

化學及生物類軟體及檔案格式簡介及應用

x-1 常見的化學檔案格式

x-2 另類化學式--文字化學式

x-3 化學軟體與化學檔案的互通

x-4 簡介應用於教學，寫網頁，文件，學位論文及期刊初稿

是否介紹 Wikipedia 有關 chemicals

是否介紹 NIST webbook, 其實 NIST 有很多化學資料

是否加入 chemical database 例如 xxxxx

http://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_database

http://en.wikipedia.org/wiki/CAS_registry_number

在大學方面, 我記得 xdrawchem 有提供光譜,

這是 Noemol 有 NMR 光譜, 或許可以試試

<http://sourceforge.net/projects/noemol/>

先看 Sourceforge.net, 再看 KDE-APP, Debian-science, Ubuntu-science, Gnome-app 應該就差不多了

http://sourceforge.net/search/?type_of_search=soft&words=earth+science

http://sourceforge.net/search/?type_of_search=soft&words=geography

編輯 PDF

Xournal

是否該列出笨牛找尋化學自由軟體的方法?

http://en.wikipedia.org/wiki/Molecule_editor

看到 free software 才看, proprietary 不看

iSee - interactive Structurally enhanced experience

<http://www.sgc.ox.ac.uk/iSee/>

JOELib 化學轉檔

<http://en.wikipedia.org/wiki/JOELib>