

# 化学の教材としての 構造式生成プログラムの作成とその活用

和歌山県立紀北工業高等学校 中田圭亮

## 1. 研究の背景

- 有機化学の授業で構造式が簡単に書ける生徒向けの簡単なソフトウェアが欲しい
- 一般向けのソフトウェアが高度な操作ができるが値段が高く操作が難しい

## 2. 研究の目的

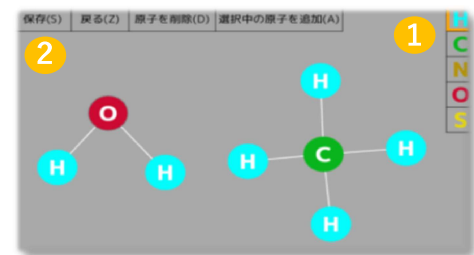
- 操作が簡単で誰でも直感的につかえること
- 作成した構造式を画像などで出力できること
- 高校生が扱う構造式などに限定して制作

以上の要件を満たすソフトウェアの開発

## 3. 使用技術

- 言語はC++で実装
- フレームワークは図形の描画、グラフィックの処理などが簡単にできるSiv3Dを使用
- 機能の追加、管理しやすいようにオブジェクト指向型で開発

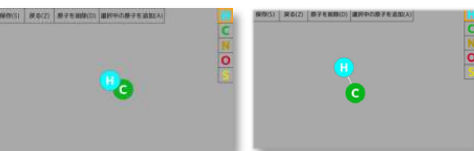
## 4. アプリの試作



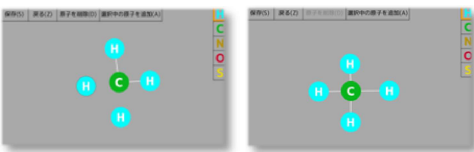
- ①の横のボタンは原子を選択するボタン
  - ②のボタンで原子の削除、追加を行うことができる
- 例として、メタン(CH<sub>4</sub>)を描くには以下の通り



- ①のボタンから追加する原子を選択
- ②設置したい所をクリックして画面に追加



- ③どちらかの原子をつなげたい原子に重ね合わせる
- ④離すと自動的にくっついた状態に



- ⑤さらに原子を追加し、重ね合わせる
  - ⑥それぞれの位置をドラッグ&ドロップで調整
- このソフトウェアを化学の先生方に実際に使ってもらい、問題点や操作感等を調査した。

- 設計上、バグや未定義動作が起りやすい
- 二重、三重結合等を作るのが難しい
- 重ね合わせる操作が不安定
- 作った人によって間隔がバラバラなので自動的に一定間隔になると楽で見やすい

問題点を解決するため、ソフトウェアを改善した

## 5. 操作の改善



- (1) 二重、三重結合用のボタン、処理を追加
- (2) 不安定な重ね合わせる操作を廃止
- (3) 誰でも同じように書けるように移動方法を変更

三重結合があるアセチレンを書くには以下の通り。



- (1) ①のボタンから追加する原子を選択  
赤い点が出てくるのでその点を追加したい場所へそのままクリックしたら画面に追加される



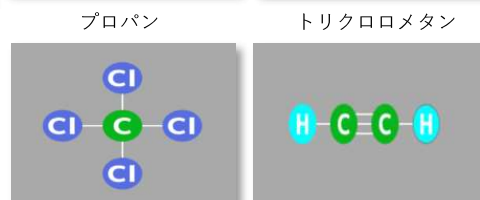
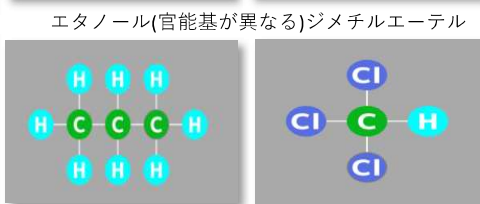
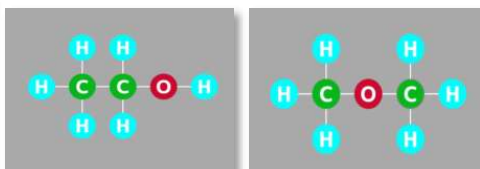
- (2) 上の線が三本のボタンをクリック、もしくは数字の3を押す(三重結合の場合)



- (3) つなげたい原子を二つクリック  
自動的に選んだ数(例:三重結合)で結合する位置は自動で調整されるのでそのままで完成

## 6. 製作できる構造式

このソフトウェアで色々な構造式を作成した。



## 7. 実装の工夫点



- プログラム上で原子を収納できる二次元配列を作成  
→同じ所に置けないようにする処理を簡略化

- 移動の度に切り捨て、再度掛けることで位置を調整  
→人それぞれの誤差をなくして見た目を整える

重ね合わせる処理よりエラー等が起きにくく、動作も軽くすることに成功



- ボタンなどに干渉しない時に円を描画し、位置修正後の座標を分かりやすい形で表示  
上記以外にも、ボタン等の表示や結合処理を「4. アプリの試作」で得られた意見を元に改良した

## 8. 活用結果

再度改善した操作方法のアプリケーションで、化学の先生や生徒に対して実際に操作してもらいインタビューを行った

良い点

- 楽しみながら構造式を作ることができる
- 構造式に対してゲーム的な目線から入れる
- 視覚的に覚えることができる
- 自動で価数も設定されるので作るのがとても楽

欲しい機能

- ベンゼン環、特性基のテンプレートが欲しい
- プリント等で使うので画像をPower Point や Word等へそのまま貼り付けれるキーが欲しい
- 足りていない原子を表示するアシスト機能が欲しい
- 文字も打ち込めるようにしたい

課題点

- 所々構造式の見え目(バランス)が崩れる

## 9. 課題

- オブジェクト指向で実装したが、画面表示やイベントの関連付け等で複雑になった  
→MVCアーキテクチャ等を導入して解決したい
- 所々構造式の見え目が崩れるのをなくしたい  
→描画方法を更に練ってなるべく崩れないように

## 10. 今後の展望

- 授業で扱うことが多いベンゼン環や特性基のテンプレートを実装したい
- 化学が苦手な生徒もいるので、そういった人にもどうすればよいか分かるアシスト機能も実装したい
- 自分は今年卒業なので、初めての人でも使い方が分かるドキュメントをGitHubなどに整備したい
- より使いやすくするために使いやすさとバランスを取りながら開発を進めたい

## リポジトリ

[https://github.com/gzhon/Chemical\\_Editor.git](https://github.com/gzhon/Chemical_Editor.git)