

# 第七屆旺宏科學獎

## 成果報告書

參賽編號：SA7-531

作品名稱：AI(Alkene Isomers)人工智慧

姓名：侯嘉豪

關鍵字：烯類異構物、雙(參)鍵、

Microsoft Visual Basic 6.0

## 壹、動機

一日，老師教到了烴類，但烴類的異構物及種類又很多，而課堂上的算法，僅能以人工方式算出碳數少的烴類異構物及種類，而且耗時又容易遺漏。

我便在想如何可以算出高碳數的異構物種類，且較不會有遺漏或重複計算的問題，而用電腦設計程式來做異構物計算就正好可克服這個問題。

然而要算出異構物的數量，是否有規則的計算方法，可以用簡單、方便的方法算出，並且讓使用者更瞭解有關異構物的結構及鍵結原理，所以我便著手設計此程式。

## 貳、研究目的

本程式可以節省人工校對的麻煩及時間，還不遺漏，關於我找到的參考的文獻是由取代基排列而成的，再加上編碼方式卻不容易看出有何規則，相較於他們，我是由碳數來判定出每種碳數的最大主鏈，再來判定出他們可能有的取代基，如此一來，在編碼上，我可看出，各個編碼之前的關連，進而找出每種編碼之前的變化。

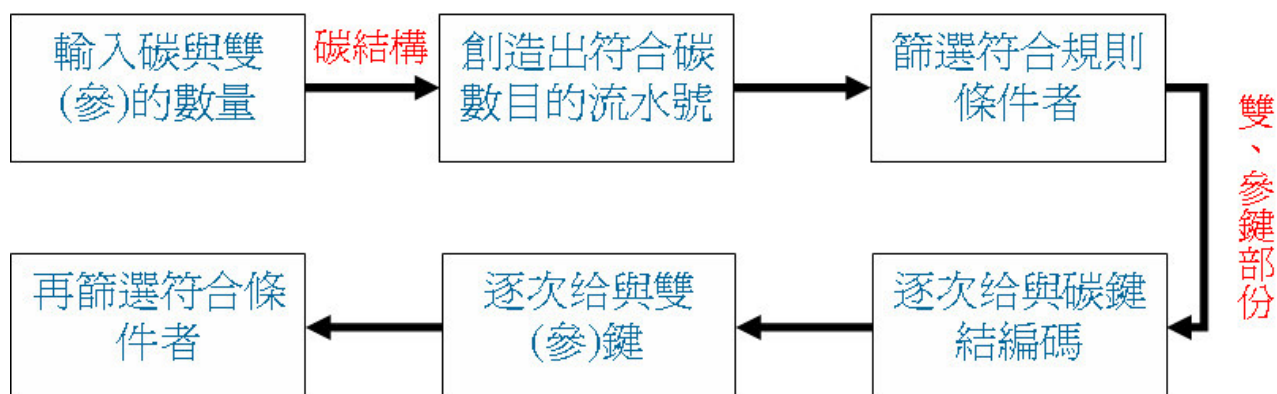
計算出編碼後，可以由編碼轉換回原結構，幫助使用者可以快速畫回。

## 參、設備

1. 電腦 2 台。
2. 應用軟體：Microsoft Visual Basic 6.0
3. ACDLabs Free Ware 5.0

## 肆、研究過程或方法

圖一、構想流程圖



### 一、編碼方式：

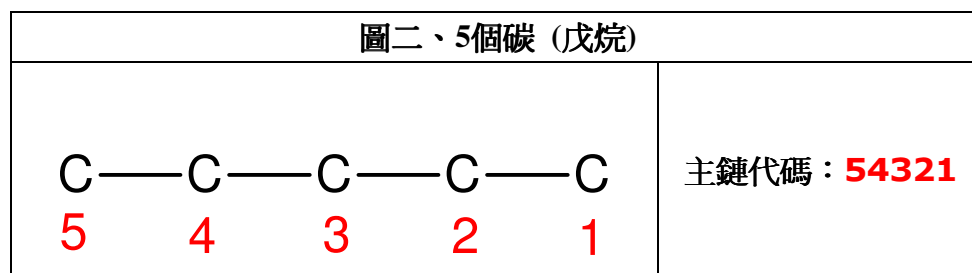
分為兩個步驟，先編輯主鍵，再編輯支鍵。

#### 1. 主鍵編碼方式：

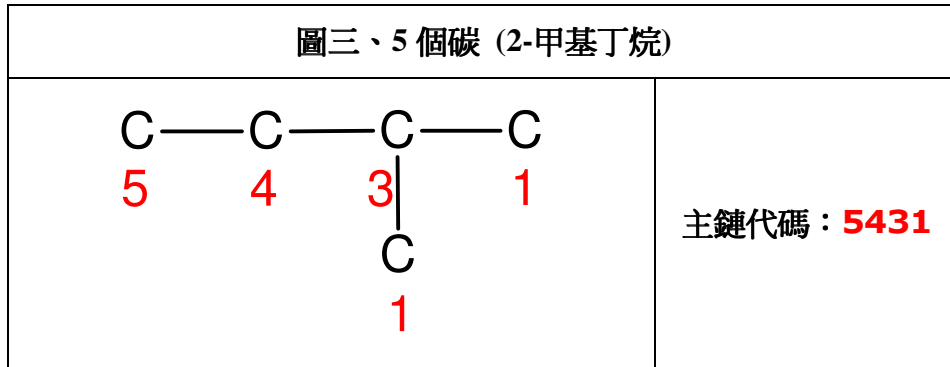
由最大碳數(輸入碳數)逐一遞減，依序到最後一個碳數即為數字”1”，而在遞減的過程中如有出現取代基，則還要再減掉其”取代基碳數”。

例：

若無基鍵，主結構編碼如下



若有取代基，主結構編碼如下

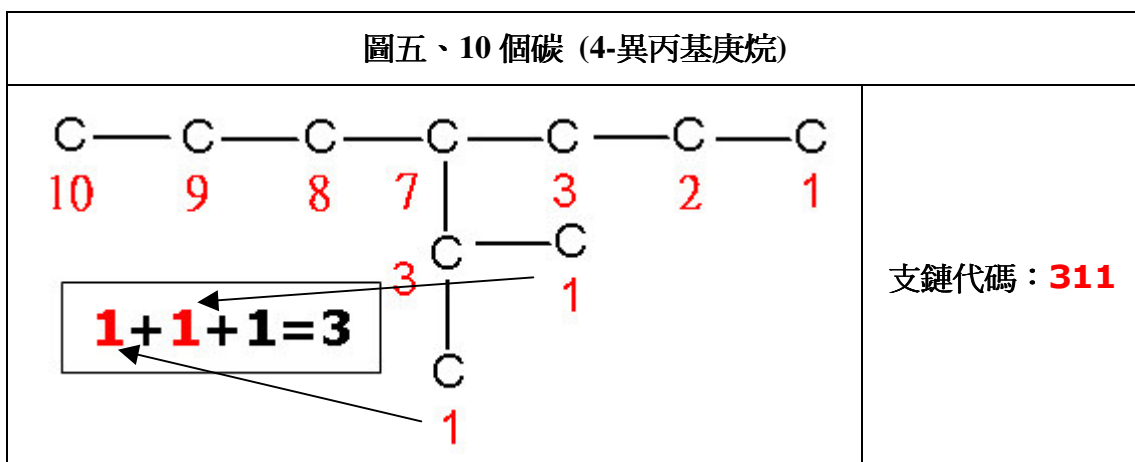
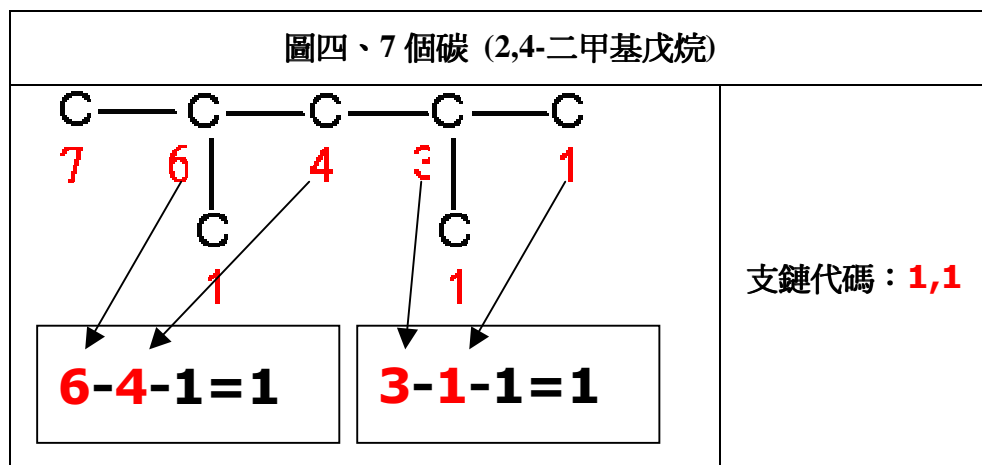


2. 支鏈編碼方式：

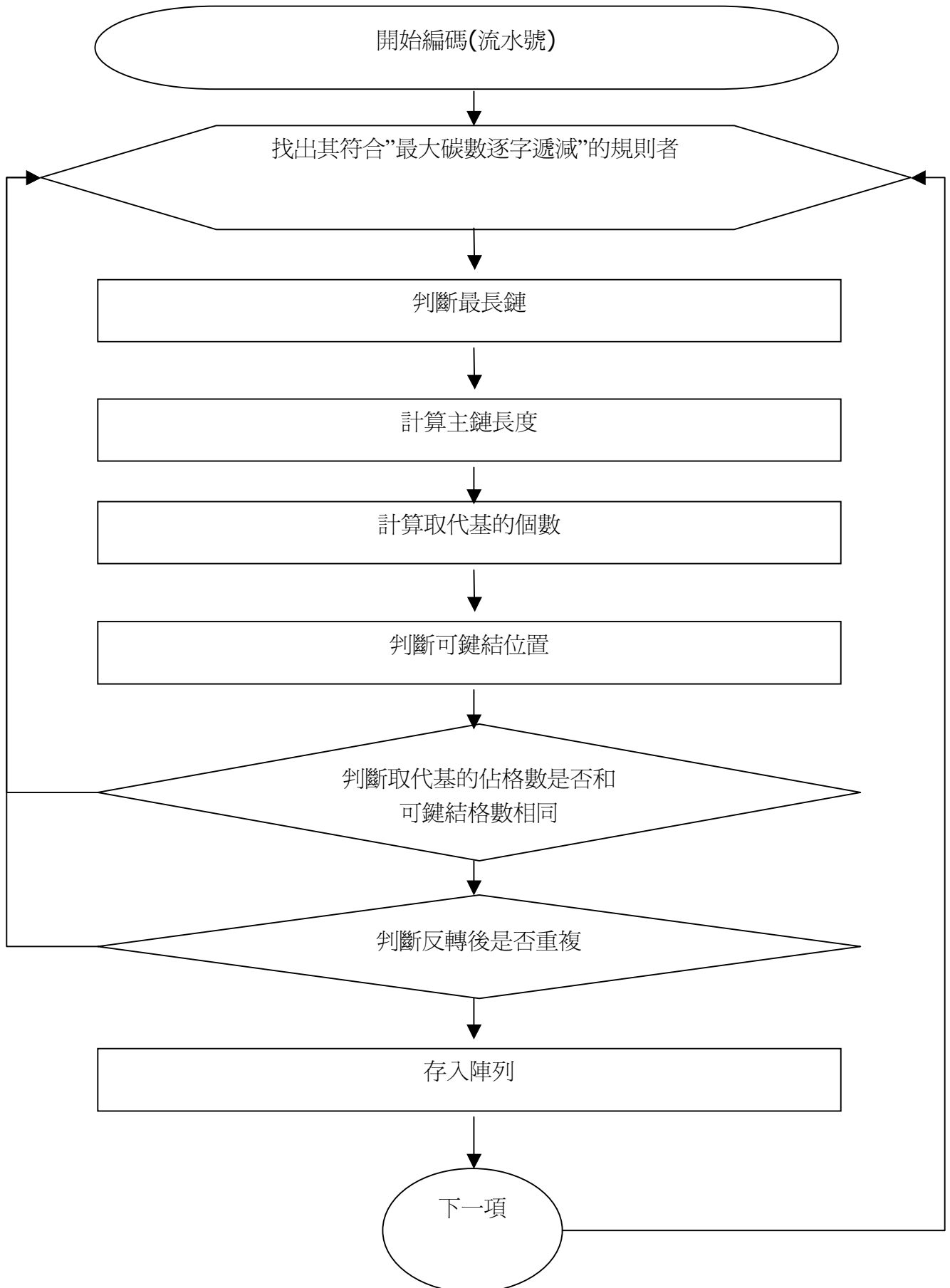
依取代基和個別碳數的多寡，一一命名，方法與主鏈雷同。

**表一、取代基**

代碼	取代基	取代基碳數	舉例
21	乙基	2 個碳	76521 <u>21</u>
321	丙基	3 個碳	10987321 <u>321</u>



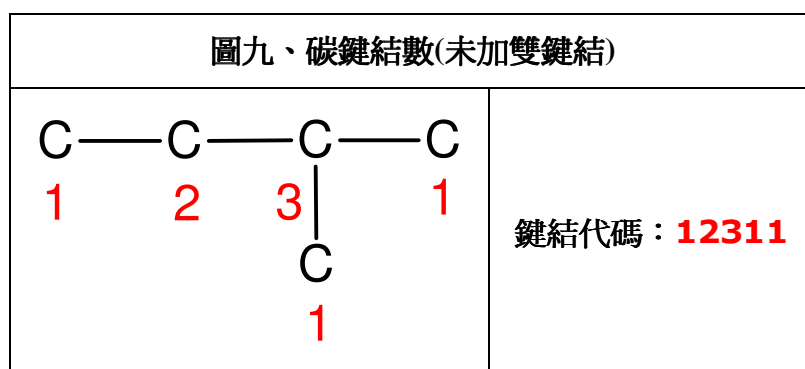
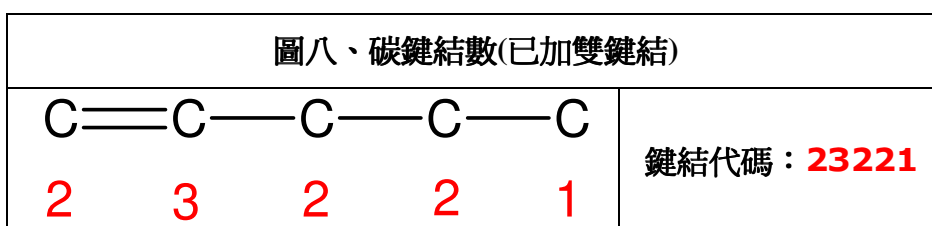
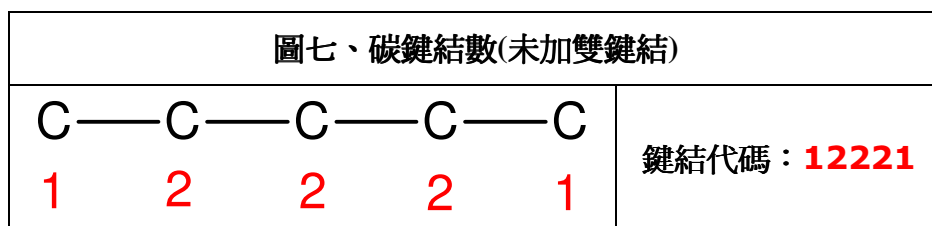
圖六、碳的主結構



## 二、碳鍵結的編碼方式：

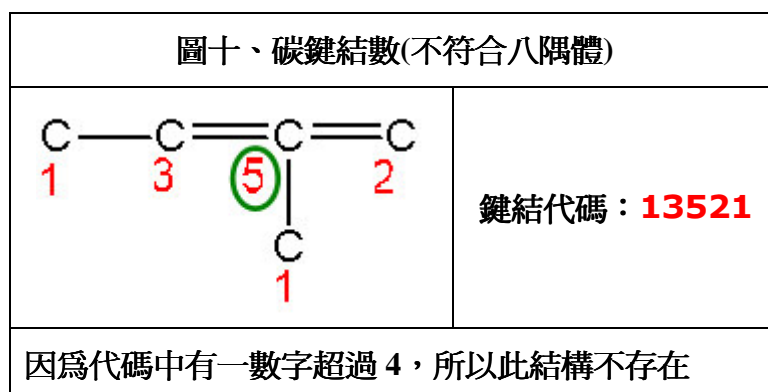
### 1. 碳鍵結代碼則為對應碳所接的鍵數

例：



### 2. 下列每個碳的鍵結數，規則為每個碳的鍵結數不可超過 4

例：

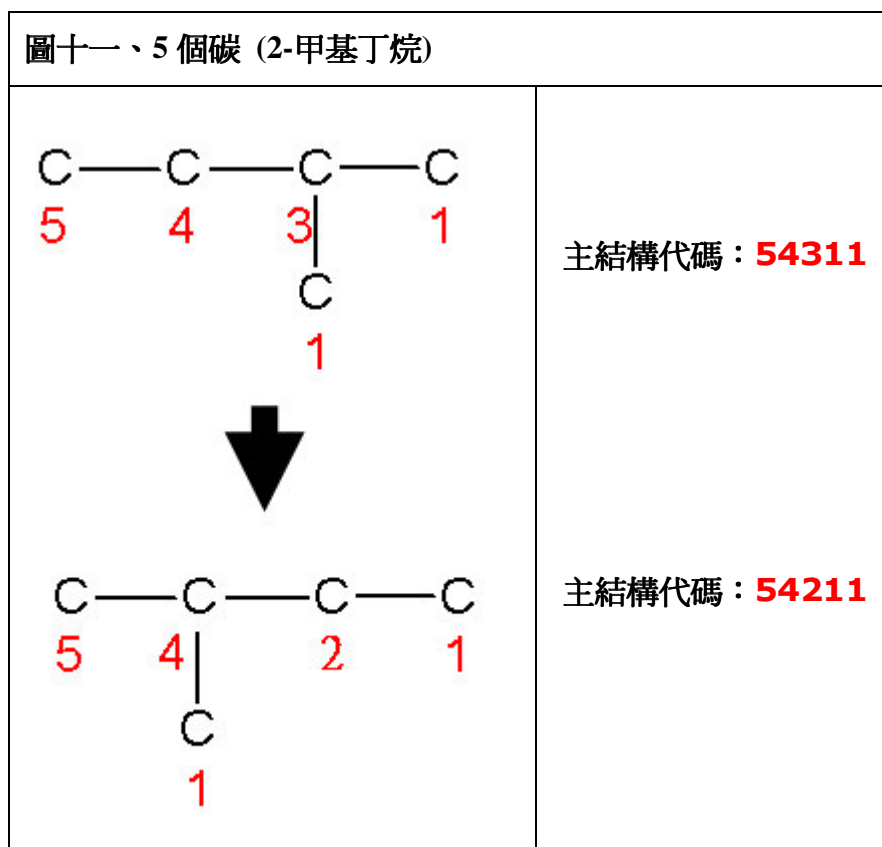


### 三、對稱性

#### 1. 主結構對稱性：

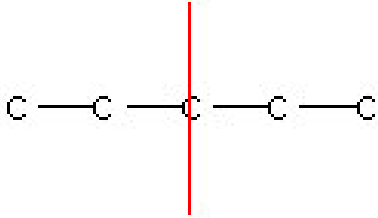
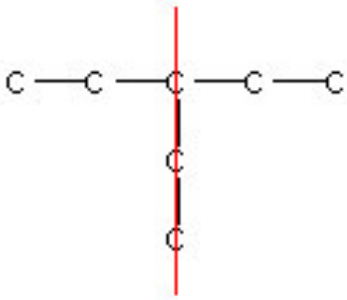
因為命名可由左至右或由右至左的關係，一種結構可能產生兩種不同的代碼，由以下的範例可得知，**54311** 及 **54211** 是同一種結構，則為避免重複，取較大的數字為主要代碼。

例：

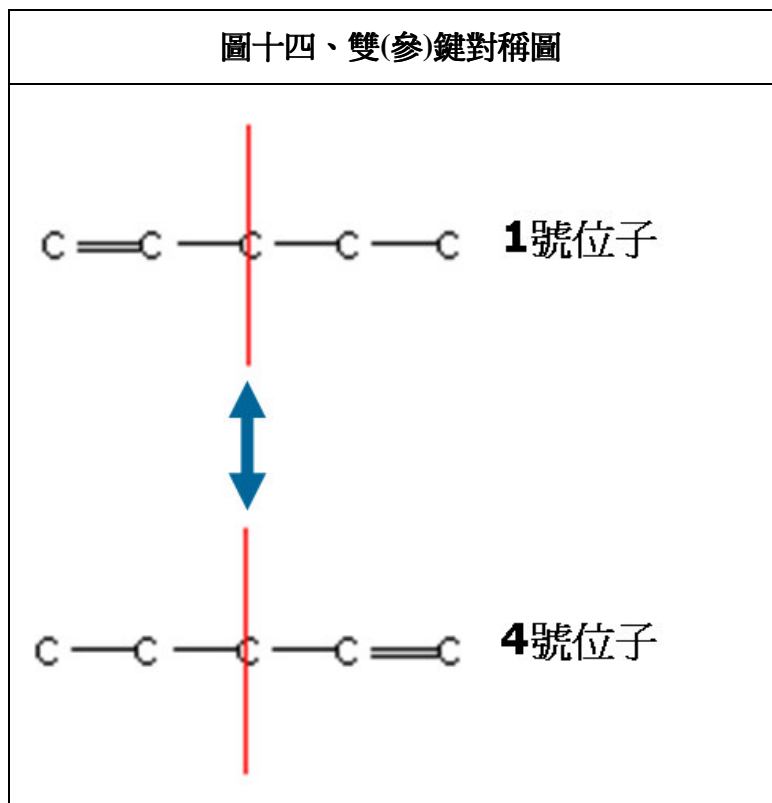


#### 2. 雙(參)鍵對稱性：

由於碳鍵結的對稱，而導致有雙鍵結對稱的問題，所以我們就要判別主結構是否有對稱性，再判定出鍵結的位子是否也對稱。

圖十二、對稱結構(無取代基)	圖十三、對稱結構(有取代基)
	

例：

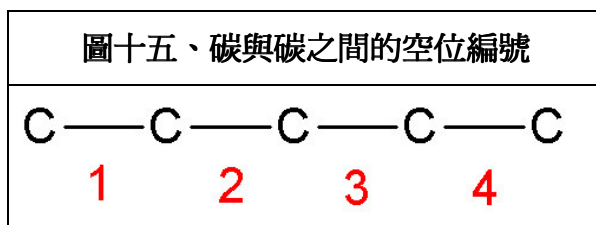


#### 四、雙(參)鍵排列：

先算出原主結構的碳鍵結，再判定出哪裡可以加雙(參)鍵，就可以找出雙(參)鍵結構的變化有幾種，那我們的簡易計算方法是給予每個碳與碳之間的空位編號，以數字排列的方式算出可能的數據有幾種。

例：若要在丁烷中放入三個雙鍵，因其有 4 個空位編號，則經過數字排列後，其結果有 123、124 和 234 三種，但事實上只有 123、124 兩種，因為還要考慮重覆的數據。

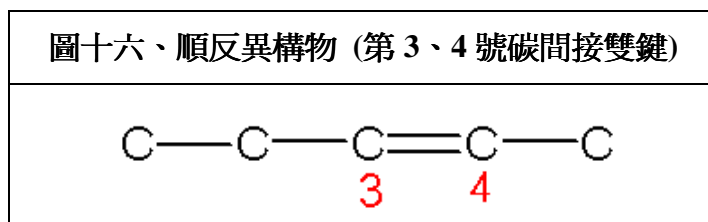




## 五、順反異構物：

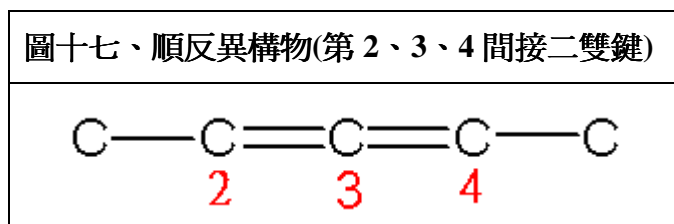
當有雙鍵出現後，因鍵結的碳與碳的旋轉方式就會被雙鍵固定，出現順反異構物。

例：



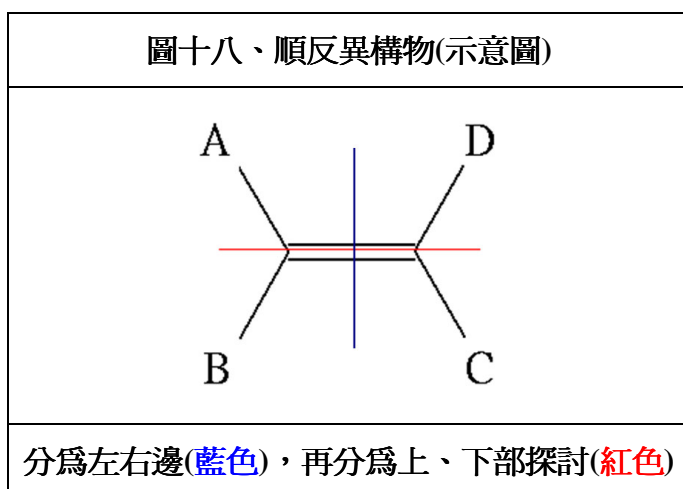
又因為雙(參)鍵在排列運算後，可能連續出現兩個雙鍵，但因其固定方式，也只能算一種順反異構物，固在此規則中，也視為“一個順反異構物”。

例：



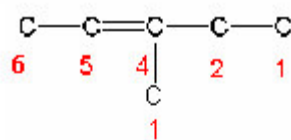
### 1. 順反異構物代碼判定：

在順反異構物的基本定義中，只要 **A** 不等於 **B** 且 **C** 不等於 **D**，即有順反異構物，所以我就繼續採用此方式，推倒可以由代碼看出的方法。

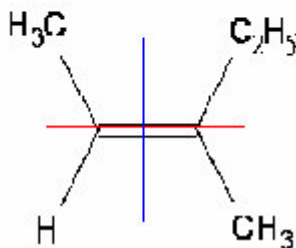


由於順式及反式要不同，也就是雙鍵左、右邊兩邊各接的“取代基”要和“主鏈”不同，所以我們先將雙鍵的左、右邊先分開來探討，再探討各所接的取代基是否與主鏈不同，若各所接的主鏈與取代基的結構都不相等，就視為有順反異構物。

圖十九、順反異構物判定圖



主鏈：6(主鏈上的第1個碳)-5=1



主鏈：4 的主鏈上的下一位=2

取代基：5-4(主鏈上的下一位)-1=0

$$1 \neq 0$$

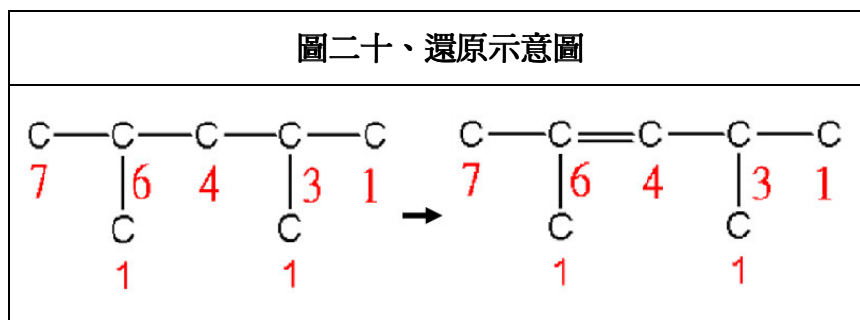
取代基：4-2(主鏈上的下一位)-1=1

$$2 \neq 1$$

### 六、編碼還原：

由於在我的程式中，共有兩組代碼，第1組為主結構代碼，第2組為鍵結數代碼，所以在還原時，可以先畫回主結構代碼，再加上其各個碳鍵結數。

例：



畫出後，鍵結數先用烷類基本的單鍵計算：1323111

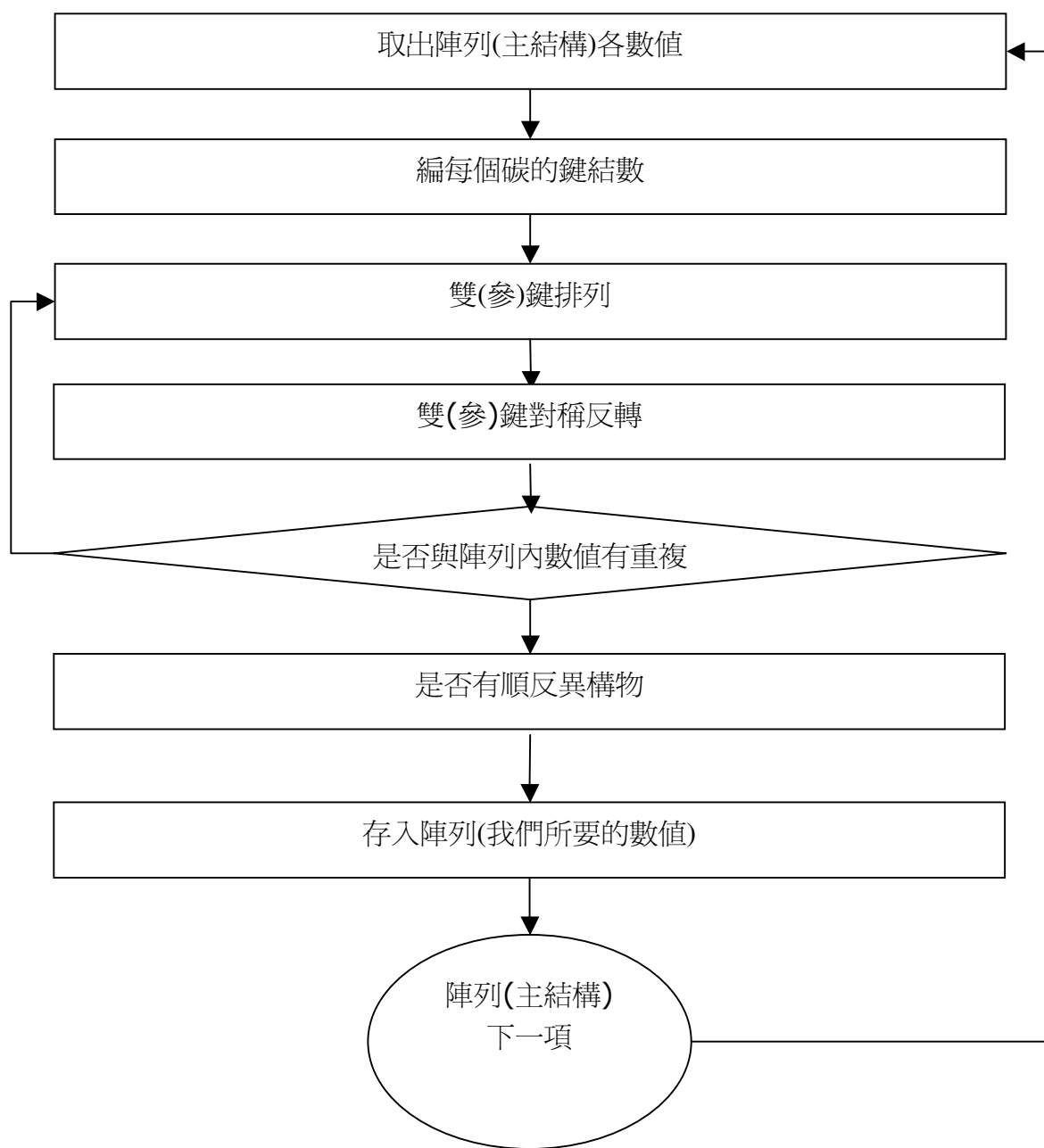
1433111

再用數據上的鍵結數與原結構的鍵結數相減：0110000

$$\begin{array}{r}
 1433111 \\
 -1323111 \\
 \hline
 0110000
 \end{array}$$

即可得知那裡還要在加鍵數。

圖二十一、雙(參)鍵排列



## 伍、研究結果

圖二十二、執行畫面(輸入前)

The screenshot shows a software window titled "Form1" with a light beige background. On the left side, there are input fields for "烷類主結構" (Alkane main structure) with a quantity of 0, "烯(炔)類異構物" (Alkene/Alkyne isomers) with a quantity of 0, and a section titled "請輸入數字:" (Please enter numbers) with three sub-inputs: "碳" (Carbon) with 0, "烯" (Alkene) with 0, and "炔" (Alkyne) with 0. On the right side, there are two empty list boxes with scroll bars. Below these are five buttons: "計算" (Calculate), "輸出(烷)" (Output Alkane), "輸出(烯)" (Output Alkene), "計算(炔)" (Calculate Alkyne), and "輸出(炔)" (Output Alkyne). Red arrows point from the input fields to the label "輸入資料" (Input Data), from the list boxes to "顯示面板" (Display Panel), and from the buttons to "匯出資料" (Export Data).

圖二十三、執行畫面(輸入後)

The screenshot shows the same software window "Form1" but with data entered. The "烷類主結構" quantity is now 3, and the list box below it contains the codes "54321", "54311", and "54111". The "烯(炔)類異構物" quantity is now 5, and the list box below it contains the codes "54321 23221", "54321 13321 0", "54311 23311", and "54311 13411". The "請輸入數字:" section now has "碳" set to 5, "烯" set to 1, and "炔" set to 0. The buttons remain the same. A red arrow points from the list box containing the codes to the text "前代碼為主結構，後代碼為雙鍵位置" (Previous code is main structure, subsequent code is double key position).

表二、5 個碳的異構物結構及代碼

編號	圖解	編號	碳的鍵數
1	$\begin{array}{ccccccccc} & & C & = & C & - & C & - & C & - & C \\ & & 5 & & 4 & & 3 & & 2 & & 1 \end{array}$	54321	23221
2	$\begin{array}{ccccccccc} & & C & - & C & = & C & - & C & - & C \\ & & 5 & & 4 & & 3 & & 2 & & 1 \end{array}$	54321	13321 0
3	$\begin{array}{ccccccccc} & & C & = & C & - & C & - & C \\ & & 5 & & 4 & & 3 & & 1 \\ & & & & & &   & & \\ & & & & & & C & & \\ & & & & & & 1 & & \end{array}$	54311	23311
4	$\begin{array}{ccccccccc} & & C & - & C & = & C & - & C \\ & & 5 & & 4 & & 3 & & 1 \\ & & & & & &   & & \\ & & & & & & C & & \\ & & & & & & 1 & & \end{array}$	54311	13411
5	$\begin{array}{ccccccccc} & & C & - & C & - & C & = & C \\ & & 5 & & 4 & & 3 & & 1 \\ & & & & & &   & & \\ & & & & & & C & & \\ & & & & & & 1 & & \end{array}$	54311	12421

0 帶表有順反異構物

## 陸、討論

### 一、烴類碳結構：

#### 1. 編碼方式(流水號)

由於要創造出一套符合碳數數目的數字出來，程式中選擇了流水號，但這勢必要花費很多時間，且數據龐大。在多次運算中，我找出了所要的數據出現規律，進而可節省計算時間和不需要的數據。

#### 2. 編碼問題

在此程式中，會出現一種異構物卻有兩種編號的問題，固因為在判定時可以從左至右，也可以從右至左的關係，所以會出現兩種代碼的問題，所以為了解決此問題，我把所有的異構物全部從中間畫一條反轉對稱軸，再從新命名一遍，如此一來便不會發生代碼不同但卻重覆的問題了。

#### 3. 取代基和鍵結位

一開始並沒有大問題，一直到了判斷取代基的位置才開始遇到了瓶頸，由於當時使用的判斷法是用「鍵結位數的總和」和「取代基上碳數總和」是否相等判定，再計算到第九個碳時，出現了問題，例如：鍵結位有一個三格和一個一格的位置，而有的卻是兩

個乙基，所以程式會誤判該異構物為正確，直到後來才改成把取代基分開計算後再扣除鍵結位，直到所有取代基和鍵結位皆符合為止，此方法的初版極為緩慢，9 個碳的判定時間甚至超過 10 分鐘，在經過多次修正到 10 秒內之後才能初步使用。

## 二、烯、炔類：

### 1. 順反異構物

起初判定的方法是將各雙(參)鍵的一一探討，但其結果發現，事實上並沒有這麼多地方有順反異構物，所以再經過校對後，勢必在有連續雙鍵出現的地方，產生了錯誤，連續雙鍵的地方就只能算出現一個順反異構物。

### 2. 順反異構物的代碼判定






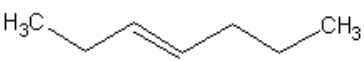
在一開始碰到順反異構物時，並沒有一個明確的計算方法，在手繪出後，才能用普通的課堂上的方法看出是否有順反異構物。在總結數據後，發現從有雙(參)鍵的代碼上下手，是最有可能找出方法的結果，但經過多次的測試後，目前也只能先找出一種簡略的計算方法。

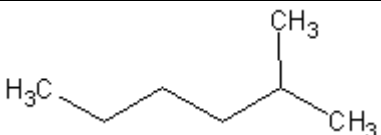
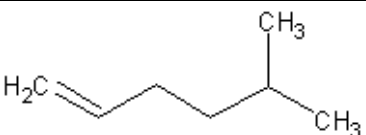
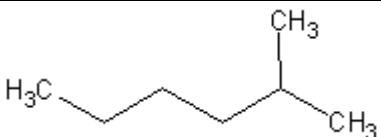
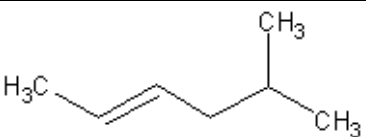
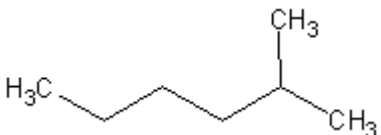
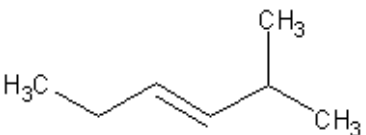
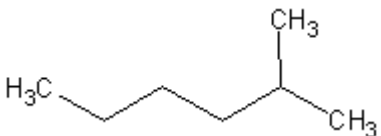
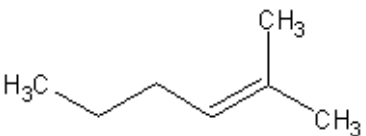
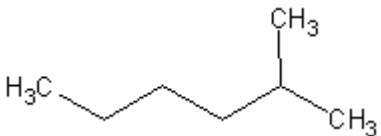
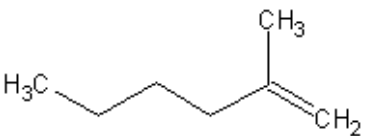
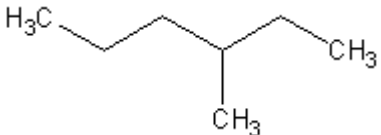
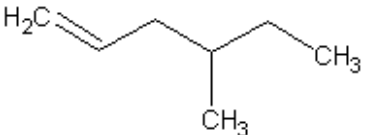
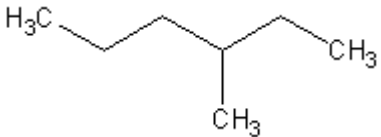
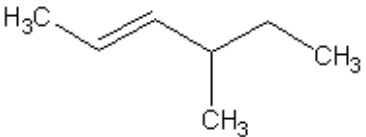
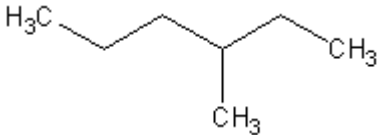
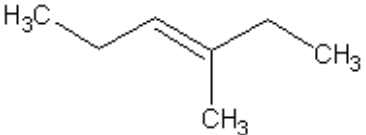
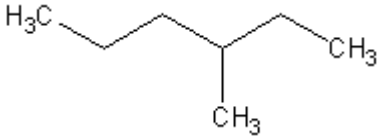
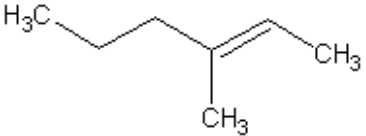
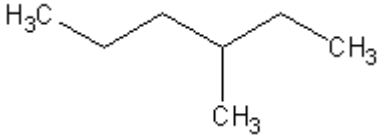
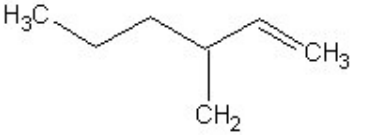
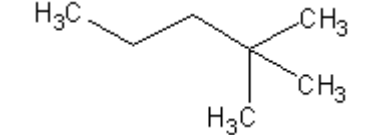
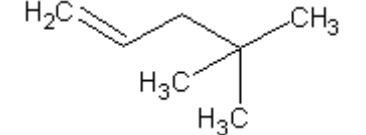
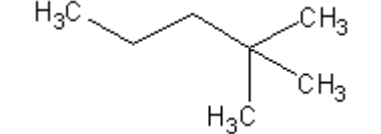
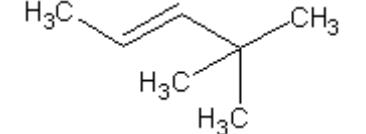
## 三、環烴類

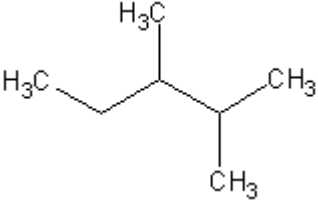
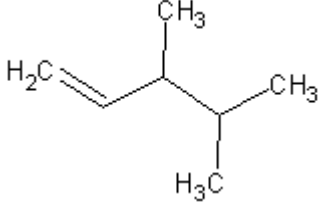
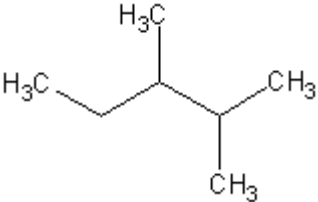
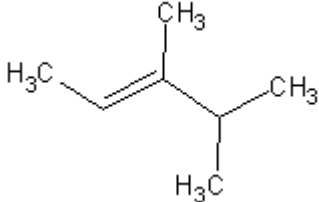
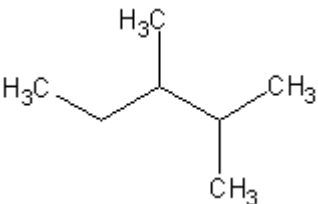
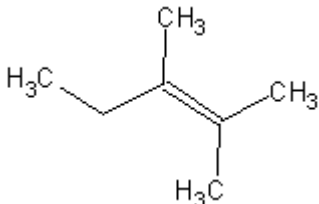
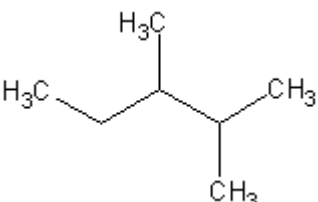
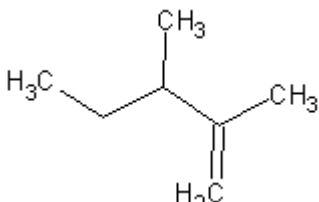
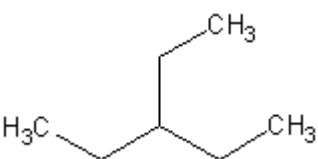
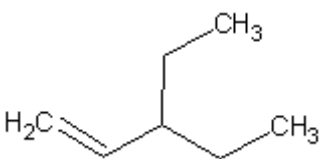
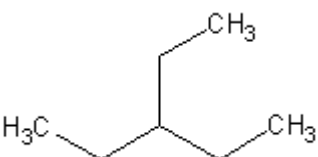
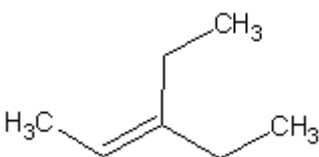
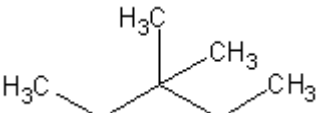
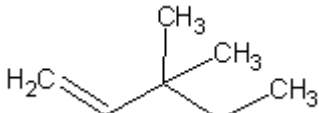
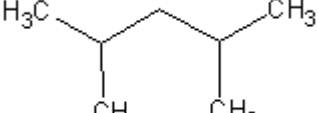
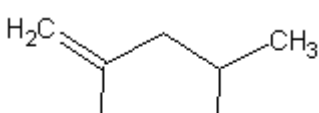
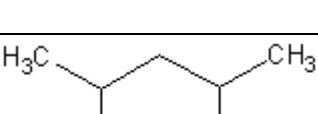
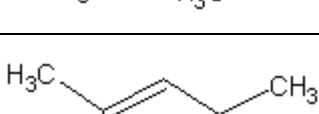
### 1. 多重對稱軸

由於環烴類是一種正多邊形的結構，勢必會有許多的對稱軸，但在環烴類上有取代基出現後，對稱軸卻會因取代基的關係而減少，再加上雙(參)鍵也會影響環烴類的對稱軸，在兩個因素的雙重條件下，且要考慮的因素太多，所以取代基和雙(參)鍵如何在環烴類由多個對稱軸翻轉，造成了一大問題，以致於沒辦法再進行其它的推演。

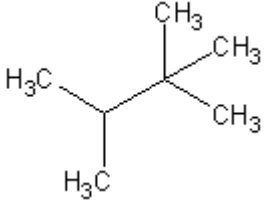
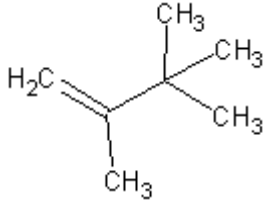
表三、碳 7(一雙鍵排列)所有節構

編號	主結構編碼	主結構圖	鍵結編碼	烯類異構物圖
1	7654321		2322221	
2	7654321		1332221 0	
3	7654321		1233221 0	

4	7654311		2322311	
5	7654311		1332311 0	
6	7654311		1233311 0	
7	7654311		1223411	
8	7654311		1222421	
9	7654211		2323211	
10	7654211		1333211 0	
11	7654211		1234211 0	
12	7654211		1224311 0	
13	7654211		1223321	
14	7654111		2324111	
15	7654111		1334111 0	

16	7653111		2333111	
17	7653111		1343111 0	
18	7653111		1244111	
19	7653111		1234211	
20	7652121		2332121	
21	7652121		1342121	
22	7652111		2342111	
23	7643111		2423111	
24	7643111		1433111	



25	7641111		2441111	
----	---------	---	---------	---

## 柒、結論

在總結所有的數據結果後，發現其結果並沒有一個簡單的計算方式，故只有使用更多的規則來判斷，目前計算到 10 個碳以上的結構後，取代基開始變得複雜(例如：異丙基)的問題，這個問題嚴重影響了之前的最長鏈判定及其它相關的判定，再加上高碳數的準確度會較低碳數要來的低，故目前還無法準確計算過高碳數的烴類異構物。

雖然說碳數太多的烴類異構物還無法完美呈現，但是在允許範圍內的烷、烯、炔類異構物還可以精準的計算出來，而且在速度上沒有太大的問題，在一定範圍內的時間不會超過 1 分鐘。

我們的這套小程式由於操作簡單易懂。由於我們的程式碼是針對「判斷」結構是否正確而來，故從跑出來的代碼就可以知道此結構圖，所以我們對未來的期望是在解決高碳數問題之後，繼續追求更完美的「圖示」呈現，以達到讓使用者「一目了然」的效果。

## 捌、參考資料及其他

1. 柯溫釗。Visual Basic 2005 Express 學習經典。
2. 李春雄、吳聲毅、林岑。Visual Basic 學習經典。
3. 賽奎春、李俊明。Visual Basic 函數參考大全。
4. 蔡政江、高承詣。化學中的數學與程式設計。
5. VB 研究小站 <http://vb.ncis.com.tw/>
6. 陳秋炳、盧木生、施建輝、王瓊蘭、莊崇仁、黃業建、廖靜宜。翰林出版社，化學課本二上，第 5 章化學鍵與烴類。