

# 平板電腦最強的化學 App—iSpartan

翁榮源

靜宜大學應用化學系

[zyown@pu.edu.tw](mailto:zyown@pu.edu.tw)

本文介紹適用於 iPad & iPhone 的兩個 App，其一為付費的 iSpartan，此為平板電腦功能最強的化學 App；其二為免費的 Mobile HyperChem，更進階的版本需要付費。此介紹提供給高中化學科、高職化工科以及大學普通化學教學的參考。

## ■ iSpartan

iSpartan 是一個 iPad & iPhone 專用的 App (見圖 1)，雖然已經上架兩三年了，算是有點貴的 App (NT\$ 599)，但是作者覺得真的物超所值。由於很多化學教師和同學還不知道有這麼好用的工具，特別借用這個篇幅來介紹。其實它的前身是非常貴的化學計算軟體 Spartan (由美國 Wavefunction 公司發展的軟體)，專門提供化學研究人員使用。主要用在化學能階計算與光譜圖預測等，一般的教育用特惠價格 (US\$ 1200 / 套)，網路上

有英文使用說明，下載網頁：

<http://downloads.wavefun.com/Spartan14Manual.pdf>。

在這裡，只針對化學教師如何運用這個工具做大略的介紹。

1. 首先是透過繪圖介面，畫出 2D 化學分子 (非常容易上手，練習個 10 分鐘後一定會使用) (按第二個圖示轉換成 3D 立體圖)。
2. 按左上角第 1 個按鈕，可以轉換呈現分子模型的方式 (可以是球與棍子，單純棍棒或者空間填滿三種呈現方式)，圖 2 是 2D 分子的棍棒模型。

圖 3 是 3D 分子的棍棒模型，依序分別為 1. 棍棒型、2. 球棍型、3. 填滿型，透過觸控可以自由移動分子結構，兩個指頭控制可以放大縮小，最棒的是隨時可以利用螢幕照相功能儲存所需要的分子結構圖片)。

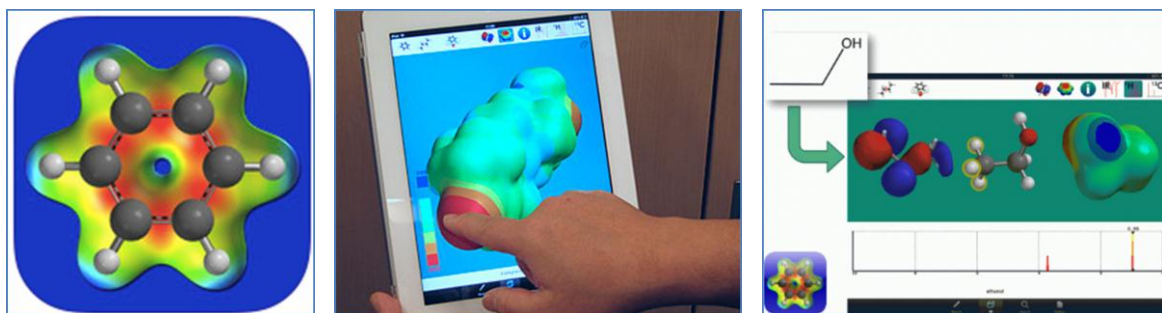


圖 1：適合 iPad & iPhone 的 iSpartan APP

- 按左上角第 3 個按鈕，下載所有光譜圖。
- 按下右上角第 3 個 IR 按鈕後，會在下面出現 IR 光譜圖，如圖 4 所示。

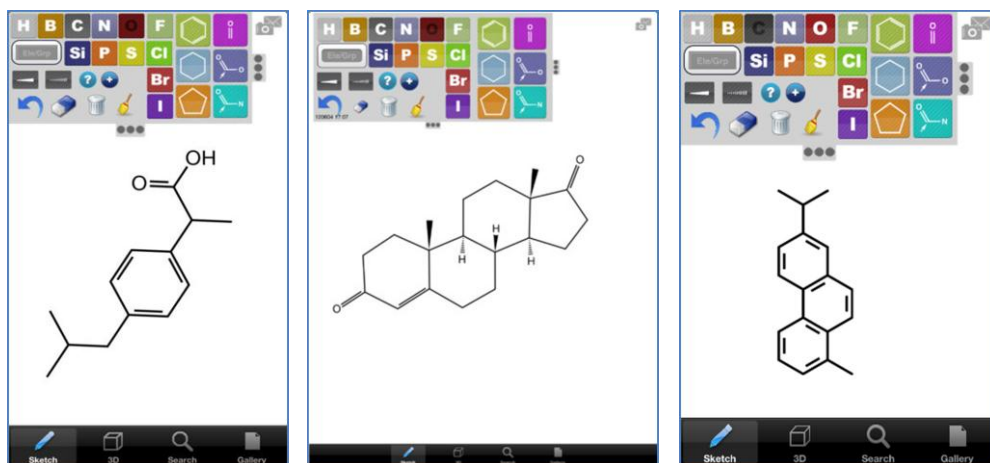


圖 2：2D 分子的棍棒模型

- 此時可以用雙指觸控拉開圖譜，而且點選到任何波峰時，除了出現波峰數字位置外，該振動會立即出現在分子結構上，並進行振動動畫。

到任何波峰時，除了出現波峰數字外，該氫原子會立即出現圈圈顯示在分子中。

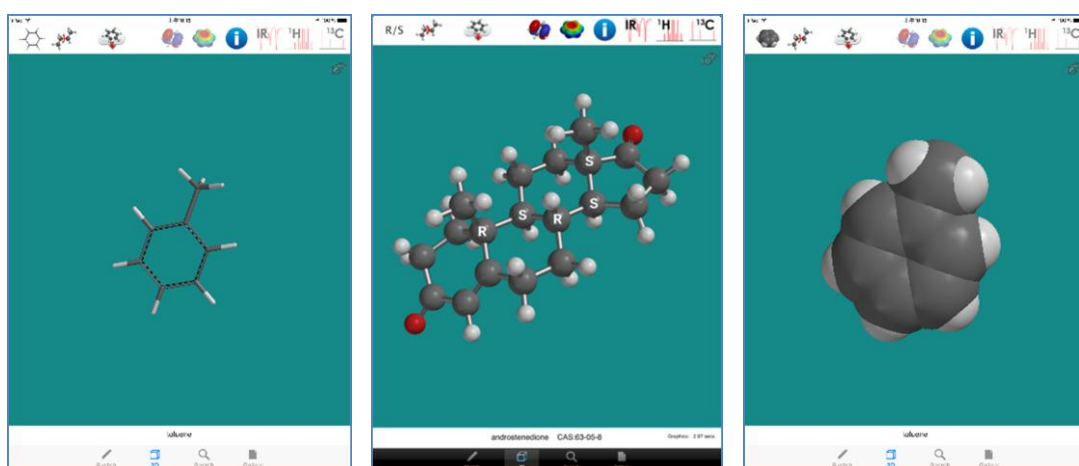


圖 3：3D 分子的棍棒模型(棍棒型、球棍型、填滿型)

- 按右上角第 2 個  $^1\text{H}$  圖譜按鈕，即可出現氫原子光譜圖(如圖 5 所示)，而且當游標移

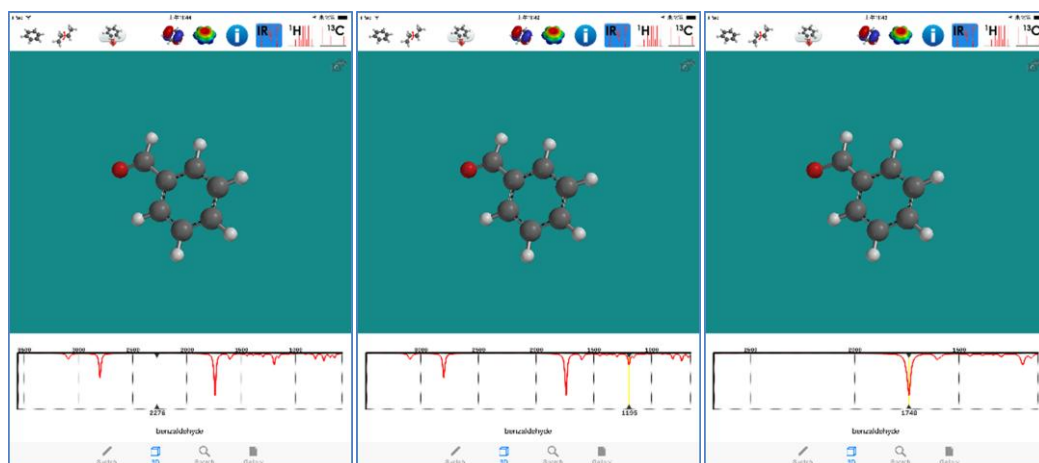


圖 4：IR 光譜圖

7. 按右上  
角第 1 個  
 $^{13}\text{C}$  圖譜  
按鈕即可  
出現  
碳原子  
光譜圖  
(如圖 6  
所示), 而  
且當游  
標移到  
任何波  
峰時, 除  
了出現  
波峰數  
字外, 該  
碳原子  
會立即  
出現圈  
圈顯示  
在分子中。

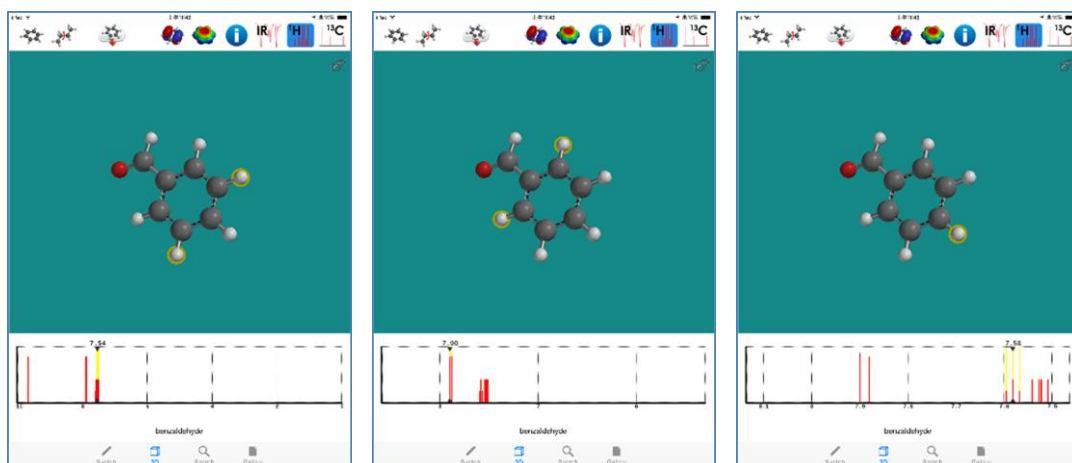


圖 5： $^1\text{H}$  氫原子光譜圖

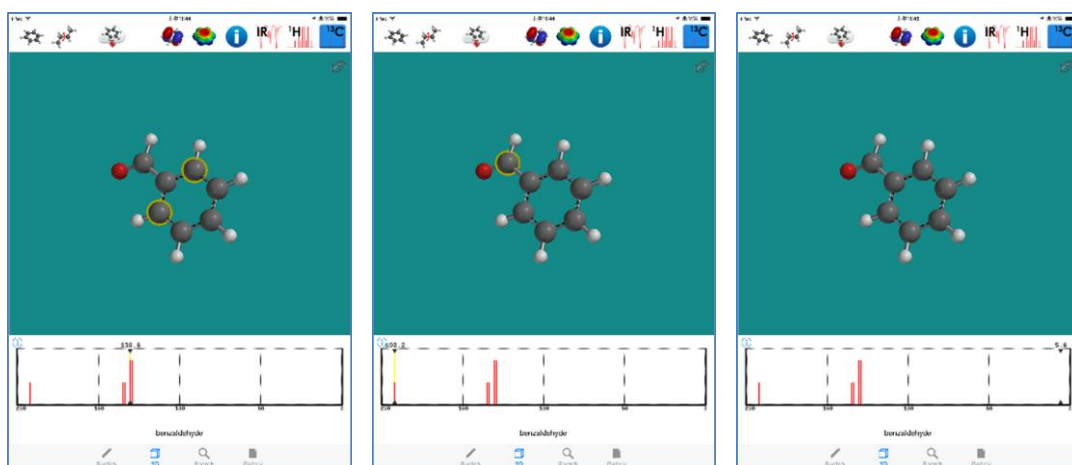


圖 6： $^{13}\text{C}$  碳原子光譜圖

原子, 出現鍵結距離。

8. 按右上角第 4 個 i 訊息按鈕, 即可出現分  
子訊息  
(如圖 7  
& 圖 8 所  
示)。
9. 圈選單一  
原子, 出  
現光譜位  
置&偶合  
常數。

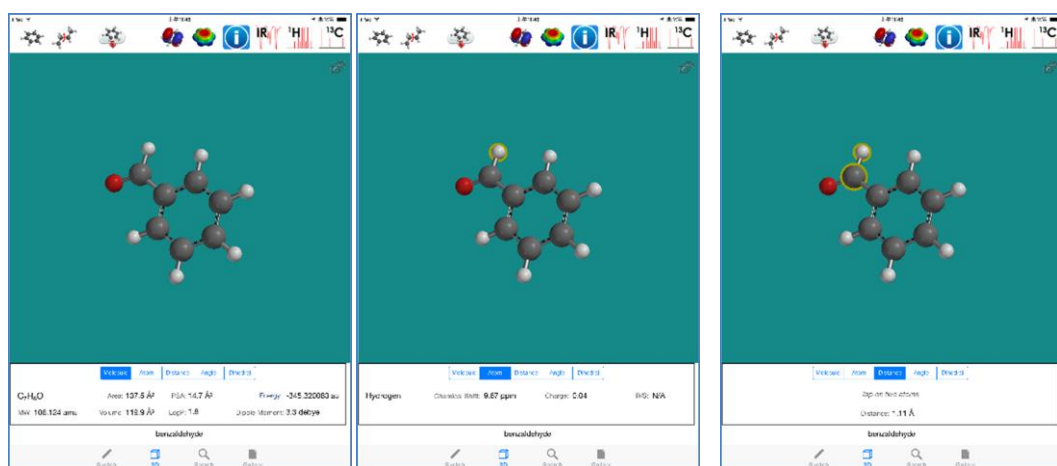


圖 7：分子結構訊息\_1

10. 圈選兩個

11. 圈選三個原子，出現較與鍵的夾角。
12. 圈選四個原子，出現雙平面夾角。

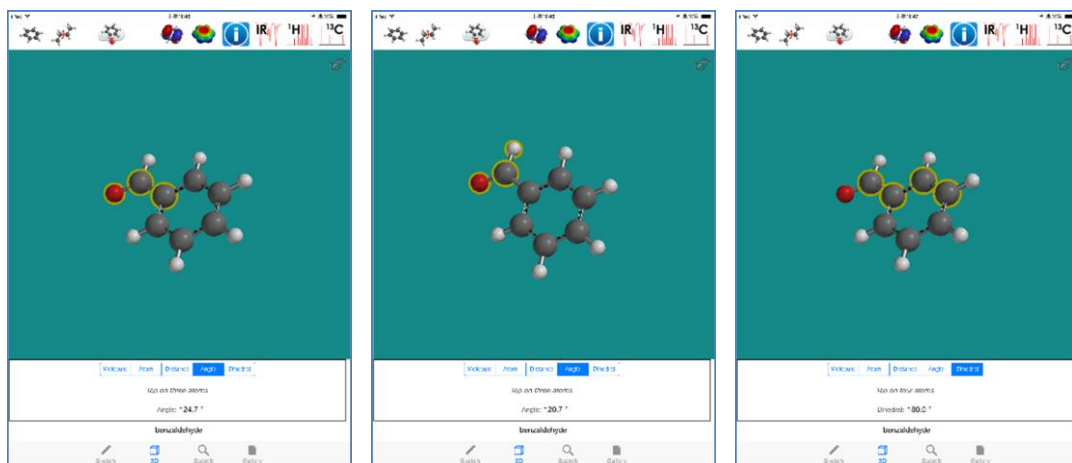


圖 8：分子結構訊息\_2

13. 按左上角第 4 個軌道圖按鈕，即可出現分子軌道訊息(如圖 9 所示)，例如 HOMO & LUMO 的分子軌道圖以及分子結構之電子密度分佈情形

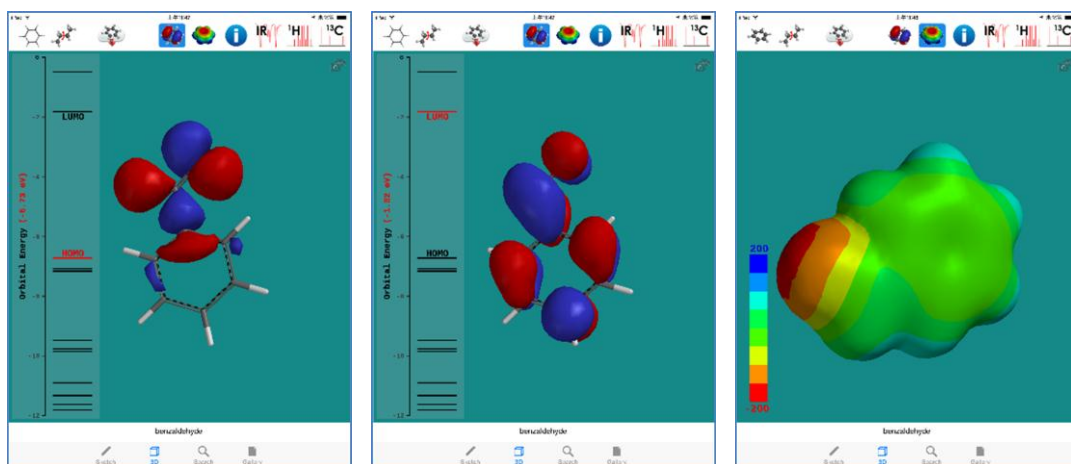


圖 9：分子軌道訊息

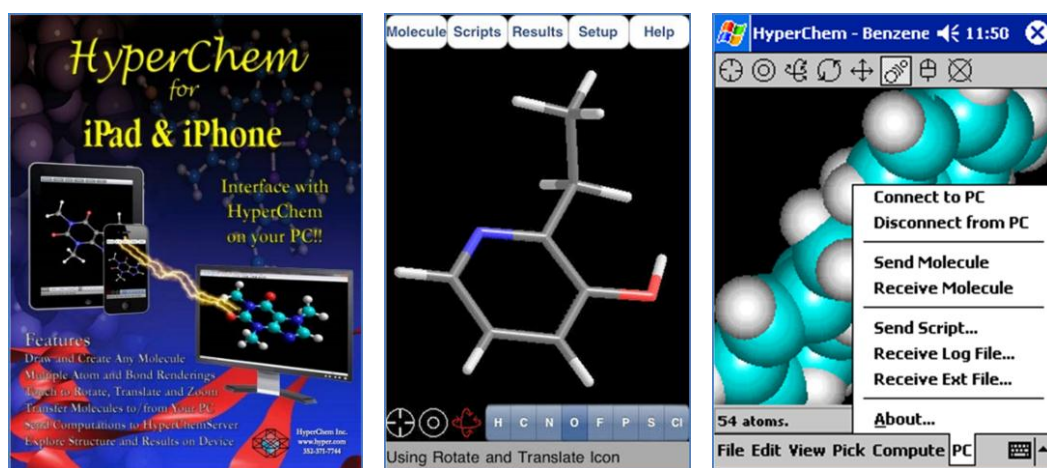


圖 10：免費的 Mobile HyperChem App

(紅色代表密度最高) 等等。

iSpartan App 的資料建置常見的分子結

構大約 5000 個，這些資料建置在一般普通化學課程的應用已足夠，如果找不到資料時，

須透過網站到 Wavefunction 總資料庫下載。

## ■ Mobile HyperChem

若沒有錢而且只需要分子結構的教師，則可以使用另外一個免費的 Mobile HyperChem App，作者常常用來繪製化學結構，同樣的利用螢幕照相功能將分子結構存成圖片，以供教學用途，如圖 10 所示。（更進階的付費版本還包含一些物理化學數據）

如果有化學教師需要化學分子結構繪圖，那麼下載此軟體版本就足夠了，非常好看的立體圖片，練習 10 分鐘就會畫所有的結構圖，非常容易上手。

## ■ 教學體驗與感想

雖然 iSpartan App 的價格不是很貴，但作者並不建議學生購買（對化學研究即有興趣學生或研究所學生除外），其主要用途是給化學老師使用，尤其是上課內容是有機光譜時，可以將上課內容先用 iSpartan 下載所有圖片訊息，非常方便的可以將所有相關類似結構之 IR & NMR & 電子密度等資訊一起對照解釋。當然最關鍵的電子分佈造成的光譜位置原因，都可以透過這些詳細的圖片一一解說。

未來，iPad 學習一定會變成大學校園中學生學習的主流工具，目前雖然在台灣的大學校園中尚未普及，但是可以預見在將來的 3-5 年內會有驚人的發展，相關的化學 App 工具也會越來越多，但是在化學教育者的眼光中，最重要的是如何將市面上的 App 工具用在個人的教學上。