

# アメリカ化学会教育部会の活動に見られる 最近2年間の化学と情報教育に関する調査

中村 彰<sup>†</sup>

A survey of concrete examples of chemical education  
emphasized with usage of computer  
reported in the articles of "Journal of Chemical Education"  
published in recent two years by  
the sub-division of American Chemical Society

Akira NAKANURA

(平成4年3月1日受理)

## 1 はじめに

この度、秋田大学教育学部に於ても「情報教育」という新しい大学教育での側面を取り入れ既にその一部が実際に機能している現状がある。情報教育という範疇で見れば、我が国に於ても方法論や取り上げる教育内容について様々な議論と実践がなされている。情報教育とコンピュータとは直接の関係はないと考えるが、2つの関わりを否定するものではない。しかし現実にはこの関わり方に対してかなりの誤解と思われる部分や先行した考えが存在することも事実である[1]。「情報」という曖昧な言葉は概念の規定の困難さも相俟って、「情報教育」が異次元の世界を彷徨してしまう危険性がない訳でもない。まして、「情報」のあとに「教育」という言葉が付け加わると理念・概念・方法・目的・目標など方向づけをすることの可能性すらおぼつかなくなると感じられる。一つだけ確かそうな前提として、「情報教育」にはコンピュータが関わることを否定出来ないことが共通理解の事項として認識されていると思われる。従って、「情報教育」に関しては、教育者の研究専門分野に依存して、当然のこととして様々な視点が存在し試行錯誤的な取り組みが行なわれていようことは容易に想像できることである。大学での初期教教育

---

<sup>†</sup>教育学部化学第二研究室

[注1]に多くの割合でかかわってきた一人として、著者の専門である化学教育に焦点を合わせてコンピュータと教育との関わりについて、色々な化学の領域で如何に取り組まれているかを紹介し、併せて私の意見を述べさせて頂きたい。

米国において「コンピュータを利用した教育」の理念の議論やその歴史は比較的初期の段階から始まっている[2]。学校や大学で用いられてきたコンピュータは、大型の汎用機から個人向けのパソコンにまで及ぶが、8ビットのパソコンがAppleより販売されるにいたって、急速に米国中に広がった。その後、AppleやIBMから16ビットのパソコンが発売されると、大学にあった8ビットのAppleは高等学校や小学校に再配分されて現在でもまだ機能していると聞き及んでいる。更には、32ビットのパソコンが登場すると、それまでの16ビット機が8ビット機と同じ有効利用に供されている現実がある。また、米国では1970年当初より、「ハイパーメディア」なる概念がコンピュータを利用した教育の手段として認識されており[3]、単なる従来の教育をコンピュータに行なわせるだけの利用に対しては批判的であったことも認識されるべき背景である。

日本に於ても多くの著述や議論が化学教育に対してなされているが、具体的な事例やコンピュータを利用した例は非常に限られており例も比較的わずかであるように思われる。そこで、今回は化学教育とコンピュータの関わりについてこの10年程の間に事例やソフトウェアや理念についての精力的な記載が最も豊富であると思われる米国の雑誌を点検して、最近2年間に引き上げられている具体例を示し動向を整理すれば、末端の試行錯誤的な利用形態が把握されたと考えた。コンピュータを用いた化学教育は米国でも緒についたばかりの現実[4]であることを考慮すれば、引き上げられて紹介されている個々の事例を批判的にせよ肯定的にせよ、紹介する事例を「叩き台的」な判断材料として位置付ければ、我々の「情報教育」に対する概念を形成するための手立てになるものと期待される。

## 2 アメリカ化学会化学教育部会と Journal of Chemical Education について

アメリカ化学会は会員数135000人を擁し、この種のものとしては最大規模の世界的な会員組織を持って活動している。その分科会は全部で31の分野(表1)に亘っている。また、会が行

表 1: 米国化学会の分科会一覧

Agricultural & food Chemistry	Agrochemicals	Analytical Chemistry
Biochemical Technology	Biological Chemistry	Carbohydrate Chemistry
Cellulose, Paper & Tetile	<b>Chemical Education, Inc.</b>	Chemical Health & Safety
<b>Chemical Information</b>	Chemical Marketing & Economics	Chemistry and the Law
Colloid & Surface Chemistry	<b>Computers in Chemistry</b>	Environmental Chemistry
Fertilizer & Soil Chemistry	Fluorine Chemistry	Fuel Chemistry
<u>Geochemistry, Inc.</u>	The History of Chemistry	Industrial & Engineering Chemistry
Inorganic Chemistry	Medical Chemiatry	Nuclear Chemistry & Technology
Organic Chemistry	Petroleum Chemistry	Physical Chemistry
<u>Polymer Chemistry, Inc.</u>	Polymeric Materials: Science and Engineering	Professional Relations
Small Chemical Buisnesses		

(注) 太文字は化学教育および化学情報に関係するもの。また、下線を付したものは独立組織体を示す。  
尚、独立組織体からは、化学会とは別にそれぞれの雑誌を発行している。

なっている事業では、26 の専門雑誌 (表 2) の発行と多岐に亘るモノグラフや著作物の刊行および単一では世界一のデータベースである化学文献抄録情報検索システム (Chemical Abstrast Service ; CAS) などが有名である。その中で、化学教育については特別に独立の機関を設けて対応している。話は少々飛躍するが、現在の米国の産業界で依然として「世界中に影響を及ぼし続け、貿易黒字を堅持しているのが化学産業である。」という記事 [2] を思い出すほどに、かの地では化学教育に力を注いでいると見受けられる。その様な背景の下での、化学教育のための独立組織が法人組織である「化学教育 (Chemical Education Inc.)」である。

この組織からは、1924 年創刊の定期刊行専門雑誌である「Journal of Chemical Education」が月に 1 度発行されている。この雑誌は初等中等教育および高等教育機関の教師と専門学校や大学の教官なども含めた人々の論文や、それら教育に対して意見を持つ人々の論文論説等が掲載されている。加えて、長年のすぐれた編集知識の積み重ねと現在の編集者の手腕によって化学教育に携わるものにとっては貴重な情報と、化学教育が進むべき将来への方向性を提供していると考えられる。その内容を列举すると表 3 の様にまとめられる。これまでの表中に太字で示した項目は、計算機利用関係の記述が詳しく掲載されているもので、数の上だけでも比較的大きく位置づけられていることが想像出来よう。この雑誌への投稿者は、米国内だけに留まらずヨーロッパ諸国、インド、中国、日本にも広く分布している。但し、コンピュータに関する記載では、残念な

表 2: 米国化学会発行の雑誌

Accounts of Chemical Research	Analytical Chemistry	Biochemistry
Bioconjugate Chemistry	Biotechnology Progress	Chemical Research in Toxicology
Chemical Reviews	Chemistry of Materials	<b>CHEMTECH</b>
Energy & Fuels	Environmental Science & Technology	
Industrial & Engineering Chemistry Research	Inorganic Chemistry	
Journal of Agricultural and Food Chemistry	Journal of the American Chemical Society	
Journal of Chemical and Engineering Data	<b>Journal of Chemical Information and Computer Sciences</b>	
Journal of Medical Chemistry	The Journal of Organic Chemistry	Journal of Physical and Chemical Reference Data
The Journal of Physical Chemistry	Langmuir	Macromolecules
Organometallics	Chemyclopedia	<b>ChemMatters</b>

(注) 太文字の雑誌は記事の中に情報関係のものも頻繁に見受けられる。

がらこの2年間の著者の中には日本人のものは見当たらなかった。化学教育部会には、University of Wisconsin-Madison を本部事務局とした Project SERAPHIM[5] なる組織が数年前に活動をはじめ、種々のパソコンに対応したアプリケーションソフトを格安(\$50 前後)で提供している。対応するパソコンの機種は、Apple, Apple II, IMB PC/Compatible, Macintosh である。現在までに数十のソフトが発行されている。また、コンピュータに関係する掲示板に掲載されたプログラムのうちのかなりのものは、この SERAPHIM なる組織に請求すれば、媒体や送料の実費だけで取り寄せることも可能である。この意味でも米国における「コンピュータ利用教育」に対する積極的な取り組み姿勢が伺えるところである。以上の様な背景から、Journal of Chemical Education に見られる記事だけを中心に実例を紹介してみたい。記事の内容は実際に行なわれているものは全て取り上げた。その数は相当な数に達する。そこで、32 ビットパソコンの普及が目だってきたこの2年間(1990-1991)の内容だけにかぎらせて頂いた。

### 3 Journal of Chemical Education に掲載されている実例

以下、いくつかの項目にしたがって概要を述べるが、著者や紹介されたソフトの譲渡の可能性および使用機種についての詳しい情報は表中に記載した。興味のある項目については直接著者に連絡出来るよう配慮したために、多少大きな資料になるが敢て著者の所属と住所および内容のキーワード的な項目も含めて掲載した。表4から表8はまとめて最後に掲載した。

表 3: Journal Chemical Education に掲載される記事の分類例

Articles of General Interest: 一般の論文や論説記事と解説記事。

化学教育にとどまらず研究にとっても役にたつ内容が多い

Features: 各号によって内容や取り上げる項目が異なる。

教科書やソフトウェア紹介と批評, 講義で用いる模擬実験や化学実験の工夫等の紹介, 新しい化学教育の試み, 試験問題の交換, 編集者の意見, 掲示板, 化学情報教育関係の記事

Secondary School Chemistry: 中学高校の化学教育に関する記事。

新しい試みや取り組み方の紹介, 子供のための化学実験や実験器具の製作の紹介, 既存の項目の解説

Laboratory Experiments: 化学実験の記事。

大学教育の化学実験の紹介, 基礎および専門教育での実験項目の紹介, 新しい実験の紹介

Notes: 様々なアナウンス記事や化学界の動向報告, 実際的な実験装置や器具類の工夫, 意見と討論

### 3.1 Computer Bulletin Board に見られる傾向 (表 4 参照)

雑誌のこの欄は、教育を含めた化学におけるコンピュータ利用の実例報告の掲示板である。

この 2 年間の傾向は、集表計算ソフト (SpreadSheet ; Lotus 1-2-3, EXCEL, Wingz, QUAT-TRO 等) を用いた例が数多く見られる。集表計算ソフトにはグラフィックス表示やマクロ命令が使用できることから、微分方程式の繰り返し計算を行なう数値解を適当なセルに格納させたのちにグラフ表示を行なわせる形式の利用が多く、例で最も強調されている点であった。Spread-Sheet が用いられるのは、Template と称される実行手順を記述したファイルが容易に作成でき、且つ移植性 (同種の集表計算ソフト間で殆ど同じ関数命令が使える) が高いことに拠るものと推察される。自作された実行型のソフトに使用されているプログラム言語は、依然として BASIC が目だっていることは注目されるべきである。これらの多くは直接に著者や SERAPHIM に請求すれば手数料程度の金額で現物を手にいれることが出来る。この 2 年の変化として特筆すべき事柄は、結構高価な MathCAD, Mathematica 等の数式処理プログラムソフトを利用した教育である。本来なら日本円で 10 万円以上もするこれらソフトを用いたコンピュータ利用教育が可能なのは、先に述べた集表計算ソフトも含めて、学校割引 (Academic Discount) や学生版 (Student Edition) の廉価販売がこれらのソフトに対して行なわれているからである。今後、日本でこの種のコンピュータ利用を考える場合には、是非上記の廉価購入を念頭にいれる必要があろう。最後に、汎用機を利用した教育はほんの僅かであったことも現在までの特徴として指摘しておくべきことと考える。

### 3.2 The Computer Series に見られる傾向 (表5 参照)

実際に教育のために開発した自作プログラムを主体にして報告されている。掲示板と異なる点は実践例の評価についても述べていることである。従って、ソースファイルや実行型のファイルが請求によって手に入れられるケースが多い。ソースファイルの記述言語は BASIC, PASCAL, FORTRAN が圧倒的に多いのも、掲示板の場合と同様に注目してよい。中には、UNIX コマンドを用いた汎用機の利用も見受けられるが、まだ例は多くない。AD 変換のボードを含むパソコンとのインターフェース (I/O) を用いた化学実験についての記載は、結構例が多く内容も豊富である。もう一つ注目されるのは、分子軌道計算、核磁気共鳴スペクトル計算、分子力場計算に代表される汎用機を利用したものも取り上げられていることであつた。この種のものの利用形態は汎用機で計算させ、パソコンにデータを転送した後に処理して画像出力させて計算結果を評価させる演習形式のものである。この種の報告は、内容的に完成度の高いものが多く、教育利用のよい指針を提供していると感じられた。この他にも、エキスパートシステムや CAI 類似の大学の一般化学や生化学の授業のための自習システムに関する報告は比較的多く、直接参考になりうるものと感じられた。また、新入生の化学実験の項目にもコンピュータ利用の実例が紹介されており興味がそそられる。パソコンを利用した教育環境の現状報告として、1500 人の入学生に対して 60 台のパソコンで行なう実例の報告などは、その管理の仕方も含めてリアリティーがあり切実な改善への訴えの様に思われた。更に、分子を動きを含めた視覚的に提示することによって、化合物の構造の理解の手助けと捕えた紹介は、化学教育の一つの将来を方向付けるものと思われる。

### 3.3 J. Chem. Educ. : Software に紹介のある SERAPHIM 発行ソフト (表6 参照)

化学教育部会の SERAPHIM から発行された教育ソフトの紹介である。事務局のあるウィスコンシン大学のスタッフ以外の人でもこのソフト作りに協力している。現実には、誰でも自由に登録出来る。実際にはこのソフトプログラムは定期的に発行される雑誌の形式を採っており、製作者は著者として認識されている。SERAPHIM にはソフトの定期刊行の他に、表4や表5に掲載された項目のもので著者の意志によってソースファイルおよび実行型ファイルなどを登録するこ

とも出来る。更に、価値の高いものに対しては、事務局から要請されて登録するケースもあると聴いている。相当な教育効果が期待されるものが数多く揃っている。「登録」というこの考え方は、化学研究のために作成されたプログラムをソースファイルの形で登録する組織 (Quantum Chemical Program Exchange; QCPE からは定期刊行物 QCPE Bulletin が発行されている) に通じるものである。発行されるソフトは、用いるパソコンの機種 (Apple, IBM PC/Compatible, Macintosh) に対応して、夫々ボリュームの数字のあとに A, B, C と識別してある。Macintosh 用のソフトはつい最近になって出現したものだが、機種の普及と操作性の簡便さ (パソコンの操作を殆ど教える必要がなく、本来の化学教育に専念できる) が反映して DOS 系のソフトをまさる勢いで増えている。中には専門の研究者にとっても非常に有用なものが含まれているのが特徴である。

### 3.4 Reviews に取り上げられた市販ソフト (表7参照)

取り上げられているソフト類は個別の専門的なものもあるが、多くは専門課程や大学初期の化学教育にとっての有用性の評価が前提になっている。評価の中身については「使用具合」「目的と中身」「教育的価値」「学生の反応」の4項目について「良 (poor)」と「平均的 (average)」および「不備 (poor)」で表している。評価には「秀 (excellent)」もあると思われるが掲載のソフトには見られなかった。価格は比較的廉価なものから高価なものまで様々であった。学生版の様なものが存在するかどうかは記載がないので、直接問い合わせるしか確かめようがない。評価については学生に実際に操作させてみて使用具合を判定しているところが面白い。

### 3.5 その他の内容と情報関係の記事と論文 (表8参照)

表に記載した事柄は一般の論文や記事の中で化学情報に関する事柄を集めたものである。ここで気が付いたことは「化学 (科学) 情報教育」に関しての実践的取り組みの報告である。化学においては「科学情報」は避けられない項目として認識されつつあり、イリノイ州の Roosevelt 大学 (Quarter 制) では従来の学部教育に付加する方法で単位を設定している様子などを、科目名も含めて詳しく紹介していることは注目すべきである。Eastern Washington University では、Competuter Science の理念を前提にたった化学を規定し、カリキュラムの具体的な単位数

まで提示している報告も見逃せない興味ある事実であろう。私の専門の有機化学と直接関係する内容として、これまで汎用機でのみ行なわれてきた有機分子の分子力場計算（分子の生成熱や歪みエネルギーの計算）を低学年の学生に対してパソコンで行なわせる意義について述べたものもあり、参考になったものもある。また、報告のいくつかは今後の日常的な化学研究の手段として位置づけられる「情報検索」に対して、将来に必要性が想定される「効率的な利用」について先取り的に学生に課すための実習内容も議論しており、情報化社会に対応したある種の先見性が感じられた。その半面、米国化学会の「化学情報分科会」の会員がたった(?) 1300人であり今後の一層の充実を望む意見も見られた。

#### 4 感想

「情報教育」に対する具体的な項目についてコンセンサスが明確に得られているわけではないことは、2年間の雑誌の内容を逐一調べた結果からも明かだと思われる。少なくともこの1990年以降の記事に見るかぎり、様々な観点に立ったコンピュータ利用の試みがなされている現実を非常に良く反映しているものと思われる。化学における情報教育を試行錯誤的に様々な試みがなされている現状が垣間見られると思う。情報教育の概念と方法については、個々の分野に規定される部分が存在する筈で、情報教育が個々の分野を規定するものではないと考える。このとき、情報教育は教育の「形態」であって「目的」ではないことになる。「情報教育」と言う言葉は、昨今極普通に使われているが、情報教育を議論する場合、そのものの位置付けを整理する必要がある。「情報処理教育」あるいは「情報基礎教育」なる用語が存在する。これらの場合、もう少し具体性を持った概念を想定することが出来る。これらは教育の「形態」ではなく、あくまでも教育の科目あるいは科目の総体として位置づけられる様な、目的性を備えた概念が想定されている筈である。

コンピュータが普及しそれを取り入れる教育が議論されたとき、「コンピュータ教育」という言葉が使われた。最近こそ誤解は少なくなったが、この言葉の意味が、「コンピュータを用いた教育」（形態）なのか「コンピュータそのものの教育」（目的）なのか明確にされないままに使われていたために、掲載記事の内容を最後まで読まないかぎりどちらのことを言っているのか判断がつかなかったことがあった。同じような意味で「情報教育」と「情報処理教育／情報基礎教



育」を区別する必要があると思う。Journal of Chemical Education に掲載されている大部分のものは化学教育の形態に関する具体的な実例がほとんどである。カリキュラムに関する議論は比較的少ないものの化学教育の目的と意義に触れたものである。形態を論ずるのは比較的自由的な発想だけで直接個々の教育者が対処出来る場合が多い。例えば、化学の教育を新しいメディアを用いるだけで色々な形態の授業が想定出来て展開出来るのに対し、新しいメディアを用いて教育を行なう目的（必然性あるいは理念）を考える場合は簡単には事が運ばない。コンピュータを用いて、それが必要と思われることに対して「何かの教育」を行なうことに対しては、何ら問題が生じない。しかし、それによって「何のための教育」を行なうかをもう一度考えてみる必要があると感じるのである。「情報教育」には、「情報メディアを利用した教育（Education emphasized with information tools）」（形態）と「情報科学の教育（Education of Information Science / Education for Computer Science）」の2面性がある。既に紹介した具体例からも分かるように、前者に対しては個々の教育者が対応出来ている。後者については、「専門の情報科学の教育」と「初期教育の一環としての情報科学の教育 [注1]」の2つを念頭置いて解決しなければならない。

日本における大学で情報科学を専攻する学生のための専門教育の改善については、今後の社会の進展に即して提言がなされている [6]。この場合は、「コンピュータの教育」が主体になっている。コアカリキュラム（Core Curriculum）と称されるコンピュータの教育のために共通に必要な科目の設定が急務であると認識されている。そのために必要となるコアカリキュラムについて私は専門家でないので殆ど何の意見も述べることが出来ない。しかし、情報科学専攻では「コンピュータを如何に利用するか」についてはどのような概念を持っておられるかは知りたいと感じている。「計算機科学（Computer Science）」なる概念は、日本では具体性をもって認識されていない様に思える。

大学における初期教育の立場から論じた報告は最近のものでは、豊橋技術科学大学でのワーキンググループに参画された方のものがある [7]。その内容は著者が勤められている特色ある大学に於てはある程度理解出来るもので、「計算機リテラシ教育」と「システム構築教育」[注2]の2本柱に一般情報教育を位置付けられている。しかし、いくつもの学部から構成している大学に於て、そこで提言されている「一般情報教育」がそのまま受け入れられるかは疑問である。

私の感覚では、専門の研究や教育で計算機の利用が日常的である分野に関係している教育者が、「情報教育」に対して持っている意見や希望および方法と目的が非常に様々であると感じられてならない。日常的にとにかく計算機を利用している者にとっては、今更目的や意義に就いて考える必要もなく、殆ど文房具的な感覚で接しているのが計算機であり目的や意義は結果としてついて回るだけのことであり、深く考えていないのが現状だと思われる。業務上行なう必要があるから計算機を使用するだけなのである。しかし、こういう利用者にとっては、個々の業務の目的が非常に細目的であることを忘れてはならない。簡単に「教育の形態」だけの問題を論じては誤解が広がるだけである。その「目的」と「理念」については是非省みてみる必要を感じる。

最後に様々の専門分野と初期教育を包括した情報教育の「目的・意義・内容」を模索するための提言を行ないたい。これは、万人が納得する「目的」を見いだすことを目的とすることするものでないことを断っておきたい。何が必要かについて幾つかの項目を見いだせば十分だと考える。どれを取り上げるかは教育者の個々の問題であり対象となる学生の問題である。はじめに米国の化学教育雑誌の記事を個別に紹介した様に、教育に携わる者の個々の専門分野で実際に使われている例を、異なる分野で報告しあうことを始めてみれば、必然的に問題が整理されるものと思われてならない。確かに時間のかかる方法ではあるが、実際に行なわれている例を知ることが我々の知らない利用形態の全貌が認識される筈である。現在、「計算機の利用」の方がはるかに「計算機を利用する意義」より先行していると思う。よって、色々な利用形態を知ったうえで最大公約数的な意義を探し得れば一定の答えに辿りつける筈である。勿論、このような一種の実利的な方法とは違った根源的な側面を考察することも重要なことであろう。

#### 参考文献と注

- [1] 江島夏実, 「シリーズ コンピュータと教育 第1回」, **Computer Today**, No.48, 64-68 (1992)

大野 豊ら, 「パネル討論会 大学における情報教育」, **bit**, vol.20, #1, 4-14 (1992)

- [2] 中村彰、並木信明、谷口清, 「秋田大学における情報処理ニーズと情報機器利用環境情報処理センターのアンケートを素材として」, 秋田大学総合科目研究紀要「情報化社会に生き

る」, pp122-135 (1991)

- [3] 浜野保樹, 「ハイパーメディアと教育革命」, アスキー出版局 (1990)
- [4] H. Beall, Report on WPI-NEACT Conference. "General Chemistry; approaching the 21th century", **J. Chem. Educ.**, **68**, #10, 835-837 (1991); (note) NEACT is an abbreviation of New England Association of Chemistry Teachers.
- [5] J. Chem. Educ.: Software; Department of Chemistry, University of Wisconsin-Madison, 1101 University Avenue, Madison, WI 53706 USA ; 尚 SERAPHIM とは 6 枚の羽を有した最上界の天使で、「化学教育」という「神」を補佐する意味合いで付けられたプロジェクト名である。会員／非会員の区別なくソフトは購入できる。1-3 個のソフトが 1 セット (雑誌の「巻」に相当) になっており、最小 5 個のコピーが認められている。約 2 倍の費用で 50 人以上のコピーも違法とならない。
- [6] 大学等における情報知り教育検討委員会 CS 分科会, 「大学等における情報処理専門教育の改善への提言」, **情報処理**, **32**, #10, 1079-1092 (1991) ; 牛島和夫, 「理工系情報専門学科におけるコアカリキュラムについて」, **情報処理**, **32**, #10, 1093-1100 (1991) ; 都倉信樹, 「情報処理教育における実験・演習」, **情報処理**, **32**, #10, 1101-1109 (1991)
- [7] 大岩 元, 「一般情報教育」, **情報処理**, **32**, #11, 1184-1188 (1991)

注 1. ここで「初期教育」というのは、今までの「一般教育」の概念と異なることを強調するために用いた。現在進行中である一般教育の改革で結論される内容に添った「個々の専門教育」と異なる大学教育を想定している。もう一つ「初期」という言葉は物理的な意味を持っていない事も強調しておきたい。

注 2. 「計算機リテラシ教育」とは、恐らく Computer Literacy Training のことを指し、一般情報教育の範疇では Keyboard アレルギーを無くすることから集表計算ソフトを含む簡単な情報処理を行なうものである。また、「システム構築教育」とは計算機を用いて大規模な問題を解決するための計算機の処理形態にとって都合の良い構想法と手順の記述 (アルゴリズム, Algorithm) を取り上げるものと考えられる。

表4: Computer Bulletin Board に関する記載項目

## Numerical Solutions for Diprotic Acid Equilibria using Spreadsheet Iterations.

O.Jerry Parker and Gary Breneman : Eastern Washington University, Cheney, WA 99004  
Microsoft Excel

J. Chem Educ., 67, #1, A5-A6, (1990)

## Modified Gran Plots of Very Weak Acids on a Spreadsheet.

F.T.Chau, H.K.Tse and F.L.Cheng : Department of Applied Biology and Chemical Technology, Hong Kong Polytechnic, Hung Hom, Hong Kong  
Lotus 1-2-3

J. Chem. Educ., 67, #1, A6, (1990)

## Computerizing a Stockroom Inventory.

Martha M. Vestling : SUNY College at Brockport, Brockport, NY 14420  
Mainframe Database

J. Chem. Educ., 67, #1, A6-A10, (1990)

## Mass Spectrometer Interface with an Apple II Computer.

John W. Stahl : Geneva College, Beaver Falls, PA 15010  
Apple BASIC and QUIK I/O commands on Varian EM-600 MS

J. Chem. Educ., 67, #3, A72-A74, (1990)

## Interfacing a Spectronic 201 to a Computer.

Efgar H. Nagel : Valparaiso University, Valparaiso, IN 46383  
Photoconduct cell (VT-800; EG&G Vactec)

J. Chem. Educ., 67, #3, A74-A74, (1990)

## A pH-Monitoring and Control System for Teaching Laboratories.

Jorge G. Ibanez, Luis Tavera, Alberto Rodriguez and Enrique Gomez del Campo : Universidad Iberoamericana, Prol. Paseo de la Reforma 880, 01210 Mexico, D.F.

BASIC [Schematic Diagrams of the circuit and copies of the software are available on request.]

J. Chem. Educ., 67, #3, A74-A75, (1990)

## A Computer-Aided Optical Melting Point Device.

Michael Masterov : Cooper Union for the Advancement of Science & Art, New York, NY 10003  
Bredy Pierre-Luis : Jamaica High School, New York City  
Raymond Chuang : Francis Lewis High School, New York City  
Experimental device with interface to microcomputer.

J. Chem. Educ., 67, #3, A75-A77, (1990)

## The Use of Equation Solvers in Teaching Chemistry.

William F. Coleman : Wellesley College, Wellesley, MA 02181  
MathCAD [Evaluation of Overlap Integral of orbitals.]

J. Chem. Educ., 67, #8, A203-A205 (1990)

## Measurement of Equilibrium Constants of Acid-Base Indicators with a Blocktronic Colorimeter.

David Walters and James P. Birk : Arizona State University, Tempe, AZ 85287  
Apple IIe; Interfacing to Colorimeter; pH monitoring with methyl orange

J. Chem. Educ., 67, #10, A252-A252 (1990)

## Using the Apple Game Port to Measure pH.

Edward Kelly : Marian College, Indianapolis, IN 46222  
Interfacing to Game Port with ADC

J. Chem. Educ., 67, #10, A254-A254 (1990)

## Do Loops in Spreadsheets.

Benson R. Sundheim : New York University, 4 Washington Place, New York, NY 10003  
Rate equation; Convolution; Root extraction; Macros; QUATTRO(Boland); Lutus 1-2-3(Lotus);

- EXCEL(Microsoft)  
 J. Chem. Educ., 67, #12, A300-A302 (1990)  
 A Comparison of Three Software Programs to Solve Acid/Base Problems.  
 Edgar H. Nagel : Valparaiso University, Valparaiso, IN 46383  
 Rate equation; Convolution; Root extraction; Macros; QUATTRO(Boland); Lotus 1-2-3(Lotus);  
 Eureka(Boland); Student Ed. of MathCAD V.2.0(Addison-Wesley); IBM PC compatible [Boland  
 softwares provide academic discount services.]  
 J. Chem. Educ., 67, #12, A302-A303 (1990)  
 Direct Solution of Schroedinger Equation for Vibration via Spreadsheet.  
 Stephen K. Knudson : College of William and Mary, Williamsburg, VA 23185  
 IBM AT; Runge-Kutta; Morse diagram  
 J. Chem. Educ., 68, #2, A39-A41 (1991)  
 A Cumulative Count Method for Determining the Half-Life of Barium-137 and Gallium-68 Radioactive Isotopes: A  
 Spreadsheet Application.  
 Elvin Hughes, Jr., Southeastern : LA. University, Hammond, LA 70402  
 Half-live  
 J. Chem. Educ., 68, #2, A41-A42 (1991)  
 Return on Investment.  
 Justin W. Diehl and Larry M. Wier : St. Bonaventure University, St. Bonaventure, NY 14778  
 Spreadsheet template; Cost evaluation of organic synthesis; Determine the scale of experiment;  
 Quattro v1.0; Lotus 1-2-3; Available to get copy from St. Bonaventure University (to the authors)  
 J. Chem. Educ., 68, #2, A42-A43 (1991)  
 Microcomputer Automation of Volumetric Titration.  
 W. C. Mak and R. S. Tse : University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong  
 Combination of digital balance(RS232C) and pH sensor(ADC)  
 IBM PC/XT/AT; AUTOITR.BAT, IRQ.EXE, INITIAL.EXE and MAINPROG.BAS ; Available on  
 request to R. S. Tse  
 J. Chem. Educ., 68, #4, A95-A95 (1991)  
 Using MathCAD in Chemistry Calculation.  
 Zoran Zdravkovski : University Kiril & Metodij, Arhimedova 5, Skopje, Yugoslavia  
 MathCAD; Graphic utilities; Equation solver; Differential equations, Derivatives; Third-year  
 Chemistry course; MathCAD files [Can be obtained from the author.]  
 J. Chem. Educ., 68, #4, A95-A97 (1991)  
 Chemical Databases and the Laboratory Computer.  
 Harold M. Bell, Kelvin Harrington and Jungun Lee : Virginia Polytechnic Institute and State University,  
 Blackburg, VA 24061  
 dBASE III: Physical properties; Spectral data; Structures; Spectral searching system(for IBM PC)  
 ChemBase: Molecular Design Ltd., 2131 Farallon Drive, San Leandro, CA 94577 [ChemBase files are  
 available on 3 x 3.5-in FD; H. M. Bell, Chemistry Dept., Virginia Tech.]  
 J. Chem. Educ., 68, #4, A99-A100 (1991)  
 Software Simulations of Fourier Transform Experiments.  
 Ron C. Estler : Fort Lewis College, Durango, CO 91301  
 FTNMR/FTIR etc: Igor (WaveMetrics, P.O. Box 2088, Lake Oswego, OR 97035); MATLAB (The  
 Math Works Inc., South Natick, MA 01760); LabView (National Instruments, Austin, TX 78730);  
 SNAP-FFT (HEM Data Corp, Southfield, MI 48076); SIGNALYS (Preston Scientific, Anaheim, CA  
 92805); Macintosh  
 J. Chem. Educ., 68, #9, A220-A222 (1991)  
 Measuring Pressure Through the Apple II Game Port.  
 James P. Birk, David Walters and Evert Frultman : Arizona State University, Tempe, AZ 85287  
 Modification of SERAPHIM software on Apple II interfaced with Game Port; SCX15DN pressure

- sensor with an SCX-EB universal board; Electronic circuit diagram [Available from SERAPHIM.]  
 J. Chem. Educ., 68, #9, A224-A226 (1991)
- How to Save Time with Current Contents on Diskette and Interlibrary Loan Requests.  
 Ernest C. McGoran : Department of Chemistry/Biochemistry, Eastern Washington University, Cheney, WA 99004  
 Current Contents; FD service on IBM or Mac from 1989; MS Word on Mac; Print Merge with PICT data  
 J. Chem. Educ., 68, #9, A226-A227 (1991)
- Quantum Mechanics with a Spreadsheet.  
 Frank Rioux : St. John's University, Collegeville, MN 56321  
 Bolemon's algorithm: Amer. J. Phys., 40, 1511 (1972); Schroedinger's equation for the Morse potential; Quattro template; IBM PC  
 J. Chem. Educ., 68, #11, A282-A283 (1991)
- Simulation of Single-Step Chronoamperometry via Spreadsheet.  
 Hal Van Ryswyk, Harvey Mudd College, Claremont, CA 91711  
 Fick's law; Cottrell equation(as a basic)  
 References :  
 J. T. Maloy, "Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry"  
 P. T. Kissinger and W. R. Heineman Eds., Dekker New York 1984  
 A. J. Bard and L. R. Faulkner, "Electrochemical Methods", Wiley NY 1980  
 D. Britz, "Digital simulation in Electrochemistry", Springer--Verlag, Beerlin 1981  
 J. Chem. Educ., 68, #11, A283-A285 (1991)
- Spreadsheet Calculation for X-ray Powder Diffraction Patterns.  
 Jeffrey Rosenthal : University of Wisconsin-River Falls, River falls, WI 54022  
 Bragg's equation; Crystal parameters; Linear Regression; Miller indices; Quattro Pro  
 J. Chem. Educ., 68, #11, A285-A286 (1991)
- Determining the Composition of an Unknown Using Atomic Emission Spectroscopy and a Spreadsheet Sort.  
 Elvin Hughes, Jr., Conaetta D. Dugas, Sam Hodges ad Sheila L. Tracey : Southeastern Louisiana University, Hammond, LA 70402  
 Lotus 1-2-3; Alternate-arc emission photometry with graphite cup electrode [Available from the authors.]  
 J. Chem. Educ., 68, #11, A286-A286 (1991)

### 表5: The Computer Series に記載されている項目

- Least-Square Fitting of Multilinear Equations.  
 Richard T. O'Neil : Department of Chemistry / David C. Flasphokler : Department of Mathematics, Xavier University, Cincinnati, OH 45207  
 Algorithm checked on VAX, IMB-PC, Apple II, Comodore 64 (in BASIC Program) and HP-41CX.  
 J. Chem. Educ., 67, #1, 40-42, (1990)
- Visualization of Electron Clouds in Atoms and Molecules.  
 John E. Douglas : Eastern Washington University, Cheney, WA 99004  
 RND function; PC; True BASIC on Macintosh; Amiga; Atari ST and IBM compatible  
 J. Chem. Educ., 67, #1, 42-44, (1990)
- Computer Simulated Process of "Lead Optimization": A Student-Interactive Program.  
 Modesto Orzco and Rafael Franco : Department Bioquímica i Fisiologia, Facultat de Química, Universitat de Barcelona, Martí i Franques 1, 08028 Barcelona, Catalunya, Spain

- IBM compatible; GW-BASIC; MLIGHT  
J. Chem. Educ., 67, #3, 232-234, (1990)
- A PROLOG Program for the Generation of Molecular Formulas.  
B. Mendez and J. A. Moreno, Facultad de Ciencias : Universidad Central de Venezuela, Apartado Postal 47906  
Caracas 1041A, Venezuela  
PROLOG; IBM compatible; FORMULAS [The source file and executable file are available on request  
accompanied with README.DOC file.]  
J. Chem. Educ., 67, #3, 234-235, (1990)
- Determination of Inflection Points from Experimental Data.  
Daniel E. Stogryn : Mount St. Mary's College, 12001 Chalon Rd., Los Angeles, CA 90049  
Plots of experimental data; Inflection points; UNIX spline and awk commands; AT&T UNIX  
\$inflect number inputfile outputfile  
J. Chem. Educ., 67, #3, 235-235, (1990)
- LAOCOON PC: NMR Simulation on a Personal Computer.  
Matthew Clark and Joseph S. Thrasher : University of Alabama, Tuscaloosa, AL 35487  
LAOCOON on IBM PC/EGA; FORTRAN  
J. Chem. Educ., 67, #3, 235-236, (1990)
- An Integrated Workstation for the Freshman Laboratory.  
John R. Amend, Ronald P. Furstenau, Reed A. Howald, Bruce E. Ivey and Kathleen A. Tucker : Montana State  
University, Bozeman, MT 59717  
Student laboratory station (Freshman labs serve 1500 students with 60 lab stations.);  
60 pH meters, 60 colorimeters, 60 Geiger counters, etc; IBM compatible per workstation less than  
\$1500  
J. Chem. Educ., 67, #4, 333-336, (1990)
- MO Theory Made Visible.  
Carlo Mealli and Davide M. Proserpio : Instituto per lo Studio della Stereochimica ed Energetica dei Composti  
de Coordinazione, C.N.R., Via J. Nardi 39, 50132 Florence  
Ext. Huckel, (CDNT, ICON, FMO: from Ronald Hoffmann), CACAO (Computer Aided Composition of  
Atomic Orbitals); FORTRAN77, Tektronix  
DOS 3.3 version is available.  
J. Chem. Educ., 67, #5, 399-402, (1990)
- Dynamic Data Storage in FORTRAN.  
Allice Chung-Phillips : Miami University, Oxford, OH 45056  
IBM PC/AT  
J. Chem. Educ., 67, #6, 500-500, (1990)
- Applying KC?DISCOVERER in the Introductory Chemistry Laboratory.  
Ronald P. Furstenau and John R. Amend : Montana State University, Bozeman, MT 59717  
KC?DISCOVERER of SERAPHIM: IBM compatible  
J. Chem. Educ., 67, #6, 500-501, (1990)
- The pH of Any Mixture of Monoprotic Acids and Bases.  
D. P. Herman, K. K. Booth and G. L. Breneman : Eastern Washington University, Cheney, WA 99004  
pH calculation of any mixture of titration;  
IBM (GW-BASIC, TrueBASIC, MS FORTRAN); Macintosh (True BASIC, MS FORTRAN)  
[Source codes are available on request to SERAPHIM.]  
J. Chem. Educ., 67, #6, 501-502, (1990)
- Methods for Calculating the pH of Aqueous Solution of Salts of Monoprotic Acids and Bases.  
Edmund R. Malinowski : Stevens Institute of Technology, Hoboken, NJ 07030  
IBM PC; BASIC; Student Edition of MathCAD and Eureka (Addison-Wesley Publishing Co., Inc.,  
and Benjamin/Cummings respectively)  
J. Chem. Educ., 67, #6, 503-504, (1990)

- Calculating Percent Boundary Surfaces for Hydrogenlike S Orbitals - An Undergraduate Computer Assignment.  
Leslie J. Schwartz : St. John Fisher College, Rochester, NY 14618  
J. Chem. Educ., 67, #6, 504-505, (1990)
- Distillation and the Macintosh: PT Nomograph, An "In-Lab" Utility.  
R. Simon and T. Benecal : University of Colorado, Boulder, CO 80309  
Macintosh; Pressure-Temperature Curve; PT Nomograph V2.0 and V1.0 (Share-ware, Desk Accessories) Lightspeed Pascal [Available from John Clark, University of Colorado at Denver.]  
J. Chem. Educ., 67, #6, 5005-506, (1990)
- Student-Designed Experiments in General Chemistry Using Laboratory Interfacing.  
John R. Amend, Ronald P. Furstenau and Kathleen Tucker : Montana State University, Bozeman, MT 59717  
Student laboratory station (Freshman labs serve 1500 students with 60 lab stations.)  
See also (J. Chem. Educ., 67, #4, 333-336, (1990))  
J. Chem. Educ., 67, #7, 593-595, (1990)
- An Inexpensive Computer Station for Undergraduate Laboratories Using the Atari 800XL.  
Edwin F. Mayern : DuPaul University, Chicago, IL 60614  
AD Converter; BASIC; IBM compatible; Assembler Language; Circuit Diagram; Lotus 1-2-3  
J. Chem. Educ., 67, #7, 696-699, (1990)
- Instructional Computing as Replacement for Recitations in Freshman Chemistry.  
James D. Spain and Joe F. Allen : Clemson University, Clemson, SC 29631  
CAI (Optional enrichment activity or study aid / 40 IBM PCs); Maintenance of the computers is shared between University Computer Service and Chem. Dept. (64 hours a week with 2 teaching-assistances).  
J. Chem. Educ., 67, #9, 766-769, (1990)
- Extensive Student Use of a Spreadsheet in Qualitative Analysis.  
Jerome L. Mullin and Robert J. Elerman : University of Wisconsin-Eau Claire, Eau-Claire, WI 54701  
Student Edition of Lotus 1-2-3 (dist. by Addison-Wesley), of Excel (dist. by Prentice-Hall : Englewood Cliffs, NJ) and SuperCalc (Computer Associates : San Jose, CA)  
Buret calibration; Gravimetric analysis; Acid/Base titration; Absorption spec; Fluorescence, etc  
J. Chem. Educ., 67, #7, 593-595, (1990)
- A Computer-Based Approach to Teach Quantum Dynamics.  
John J. Tanner : University of Houston, Houston, TX 77204  
Split operator; Fast Fourier transform; Grid solution of the time-dependent Schroedinger's Eq.; Wave function trajectories; Dynamic calculation of Energy levels  
J. Chem. Educ., 67, #11, 917-921 (1990)
- Teaching Biochemistry.  
Helen B. Brooks, David W. Brooks, Sheldon M. Schuster and Dwane E. Wylie : Center for Science, Mathematics and Computer Education, University of Nebraska-Lincoln, Lincoln; NE 68588  
HyperCard on Macintosh [Copies are available on request.; Biotechnology, Science Center, University of Nebraska, 118-HenzlikUNL, Loncoln, NE 59588]  
J. Chem. Educ., 67, #12, 1033-1034 (1990)
- Simulation of the Infrared Spectrum of HCl.  
Quian Pu : University of Suzhou, Suzhou, 215006 P.R.China  
Apple II; BASIC; HCl; IR simulation; gaseous; The program is available from SERAPHIM  
J. Chem. Educ., 67, #12, 1034-1036 (1990)
- A Short Program for the Automatic Calculation of pH in Solutions Having Many Acids or Bases.  
Juan Miguel Campanario and Reyes Ballesteros : University of Alcalá, 28871 Alcalá de Henares; Madrid, Spain  
IBM compatible; GW-BASIC; Derivation of general formula  
J. Chem. Educ., 67, #12, 1036-1037 (1990)
- A Spreadsheet Type I/O Interface for C, Fortran and Pascal.  
Roy Karli : Laurentian University, Sudbury, ON, Canada P3E 2C6  
Versatility of Spreadsheet programs; Application Program Interfaces (input from spreadsheet cells and



output to them); SSIO(Spreadsheet I/O) [Available from Project SERAPHIM written in Microsoft C; Compatible with Microsoft C]; QuickC; FORTRAN and PASCAL; IBM PC(with DOS 2.1 or higher); Microsoft C v5.0 or Microsoft QuickC v 2.0

J. Chem. Educ., 67, #12, 1037-1038 (1990)

#### Molecular Mechanics Calculations of [3,3]Metacyclopheane

Silvio E. Biali : The Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem 91904, Israel

Advances Organic Chemistry Laboratory at the Hebrew University; Estimation of preferred conformation ;

Sufficiently small molecule, Sufficient complexity, Crystal structures; BIGSTRN-3 implemented with Allinger's MM2(85) (C2v, Cs,Ci point groups); VAX 750 (calculation); Macintosh (graphical drawing); Internal coordinates to Cartesian coordinates; Newton-Raphson method for geometry optimization

BIGSTRN-3 is available from QCPE (No.514) ( R. B. Nachbar, Jr & K. Mislow, QCPE Bull, 6, 96 (1986)).

MM2(87) from QCPE (Univ. Indiana, Bloomington, IN 47405)

N. L. Allinger et al., Compt. Chem., (1987) 8, 581

J. Chem. Educ., 67, #12, 1038-1039 (1990)

#### Normal Coordinate Calculations as a Classroom Computer Project.

Arthur Barlow and Max Diem : City University of New York, Hunter College, 695 Park Ave., New York, NY 10021

Normal Coordinate Analysis(NCA); BMAT(QCPE; QeMP067)(University of Indiana, Bloomington, IN); Graduate course of a total enrollment 7 students; Potential Energy Distribution(PED); 99 x 99 matrix; IBM PC; FORTRAN

J. Chem. Educ., 68, #1, 35-39 (1991)

#### Computer Interfaced Fast KINETICS Luminescence Decay Experiment.

R. M. Ballew, J. N. Demas, N. P. Ayala, M. Grubb and S. W. Snyder : University of Virginia, Charlottesville, VA 22901

Stern-Volmer quenching experiment; Eu(III) , Ru(II) and Tb(III) complexes with long lifetimes; Linear least-square; Rapid lifetime determination; IBM PC; 12-bit Data Transition(2801A); Turbo Pascal; Electronic circuit diagrams; source codes [Available on request from J. N. Demas (FASTKIN)]; CGA, EGA, VGA

J. Chem. Educ., 68, #3, 222-225 (1991)

#### Measuring the Photodecay of Lightsticks Using the Blocktronic Interface.

John K. Estell : Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1304 W. Springfield Ave, Urbana, IL 61801

Blocktronic (developed by Project SERAPHIM); Apple II game I/O port interface:

D. Krause and L. Davis, J. Chem. Educ., 65, A1 (1988)

J. Chem. Educ., 68, #3, 225-228 (1991)

#### Approach to Equilibrium: The Wasp and Beetle Model. Statistical Insight into How Equilibrium is Achieved and the Stability of an Equilibrium State.

Albert Chang and Russell D. Larsen : Texas Tech Univesity, Lubbock, TX 79409

Common examples of equilibria (rain fall, a ball rolls down a hill, ink mixes in a beaker of iron rusts):

P. and T. Ehrenfest in 1907(dog-flea model)

Introductory chemistry course:

Wasp model, Simulation of Wasp movement, Poincare's reoccurrence theorem

J. Chem. Educ., 68, #4, 297-300 (1991)

#### Determination of Concentrations of Species Whose Absorption Bands Overlap Extensively. An Instrumental Analysis Laboratory Experiment.

C. Cappas, N. Hoffman, J. Jones and S. Young : University of South alabama, Mobile, AL 36688

Multivariate least square method; IBM PC; RS232C(from PE Model 3600 Data Station); BITCOM software; BASIC; N-equations-in-N-unknowns(N-in-N method)

- J. Chem. Educ., 68, #4, 300-303 (1991)
- CHEMPROF. An Intelligent Tutor for General Chemistry.  
 Arthur Eggert and Catherine Middlecamp : University of Wisconsin-Madison, Madison, WI 53706  
 Elizabeth Kean : University of Nebraska at Lincoln, Lincoln, NE 68588  
 General Chemistry: Chemistry Tutorial Program for Minority/Disadvantaged students.  
 CHEMPROF: Visualized assistance with most first-year topics.  
 Intelligent Tutoring System(ITS): Turbo Pascal.  
 Teaching Knowledge Base(TKB): Concept of the project.
- J. Chem. Educ., 68, #5, 403-407 (1991)
- Numerical Method to Calculate Equilibrium Concentration for Single-Equation Systems.  
 E. Weltin : University of Vermont, Verlington, VT 05405  
 Gibbs free energy; Chemical potential; Affinity; IBM PC [Available from SERAPHIM.]
- J. Chem. Educ., 68, #6, 486-487 (1991)
- Two Dimensional Atomic and Molecular Orbital Displays Using Mathematica.  
 Randolph Cooper and Joseph Casanova : California State University, Los Angeles, Los Angeles, CA 90032  
 Mathematica: Orbitals.m; Visualization of hybrid and molecular orbitals on Macintosh [Further  
 informations on this topics are available from J. Casanova.]
- J. Chem. Educ., 68, #6, 487-488 (1991)
- Molecular Modeling as an Integral Part of an Advanced Lab Course.  
 Stuart Rosenfeld : Smith College, Northampton, MA 01063  
 Undergraduate Curriculum; Molecular mechanics; Heat of formation  
 PCMODEL/PCDISPLAY (Serena Software, P.O. Box 3076, Bloomington, IN 47402)(PLUTO and  
 ORTEP drawing on CRT); IBM PC
- J. Chem. Educ., 68, #6, 488-489 (1991)
- A Voltammetry Experiment by Digital Simulation.  
 Gaspar Sanchez, Guillermo Codina and Antonio Aldaz : Universidad de Alicante, Aptdo. 99, 03080 Alicante,  
 Spain  
 Cyclic voltammetry; Fick's diffusion equation; Cranck-Nicholson's method; IBM PC; Macintosh  
 [A readable copy is available from SERAPHIM.]
- J. Chem. Educ., 68, #6, 489-490 (1991)
- Interactive Computer-Video Programs Used in the Process of Chemistry Teaching.  
 Hanna Gulinska, Rafal Lewicki and Andrzej Burewicz : A. Mickiewicz University, Grunwaldzka 6  
 60-780 Poznan, Poland  
 Modern and multimedia techniques; Interfacing with Video system  
 Three concepts: Information, User's step and examples of Chemistry lessons
- J. Chem. Educ., 68, #6, 490-492 (1991)
- The Use of the Desktop Molecular Modeller Software in the Teaching of Structural Chemistry.  
 S. Adukdecha, P. Akhler, P. Field, P. Nagel, E. O'Sullivan, K. O'Connor and B. J. Hathaway : University  
 College, Cork, Ireland  
 Molecular Modeler(DTMM)(Oxford University Press, Oxford ; £ 300 with a 50% academic discount)  
 IBM AT with 512K RAM written in Pascal and displayable on color EGA or VGA  
 Menubar-driven (FILE/STYLE/VIEW/CALC/EDIT/UTIL) (Oorganic/Inorganic/Complex/Crystal)
- J. Chem. Educ., 68, #7, 576-583 (1991)
- Teaching Chemistry with Expert Systems. Systematic Chemical Separation of Cations in Aqueous Media.  
 M. S. Larrechí and F. X. Rius : University of Barcelona, Pl. Imperial Tarraco, 1, E-43005, Tarragona, Spain  
 Expert system(differentiating from CAI program):  
 C. Cachet et al., J. Chem. Educ., 66,553-557 (1989)  
 KES on IBM PS/2 (J. W. Moore and E. A. Moore, J. Chem. Educ., 61, 699-703 (1984) ):  
 [Runtime version is available from the authors.]  
 Analytical chemistry (24 cations)

- J. Chem. Educ., 68, #1, 35-39 (1991)  
 Computer-Assisted Molecular Modelling for Undergraduate Organic Chemistry Students.  
 Vernon G. S. Box : City College of C.U.N.Y., New York NY 10031  
 Computer-Assisted Molecular Modelling(CAMM)  
 STR3DI.EXE (MS-DOS(mouse/VGA or EGA/600 KB free RAM):  
 [Available from the authors or can be downloaded from Compuserve's Science Forum Library  
 #3]  
 MMX.EXE(with pi-calculations)(ERENA Software)  
 J. Chem. Educ., 68, #8, 662-664 (1991)  
 A BASIC Program for Computing Reactant Combinations from Approximate Elemental Analysis Data.  
 Udayampalayam P. Senthilkumar, Rajagopalan Vijayalakshmi and Ramasubbu Jeyaraman : Bharathidasan  
 University, Tiruchirappalli-620 024, India  
 IBM BASIC; Microsoft BASIC  
 RECOMB (Can manipulate C/H/N/O compound(Figure of algorithm of RECOMB).)  
 J. Chem. Educ., 68, #9, 773-776 (1991)  
 Computer Interfacing. A New Look at Acid-Base Titrations.  
 John R. Amend, Kathleen A. Tucker and Ronald P. Furstenau : Montana State University, Bozeman, MT  
 59717  
 See also (John R. Amend, et al., J. Chem. Educ., 67, #4, 333-336, (1990))  
 Student laboratory station; Some variations with photogate drop-counter  
 J. Chem. Educ., 68, #10, 857-860 (1991)  
 Advanced Titration Plots Using Spreadsheet Scripting.  
 James O. Currie, Jr., and Richard V. Whiteley, Jr. : Pacific University, Forest Grove, OR 97116  
 Wingz(Informix Software) on Macintosh; Hyperscript  
 Acid-Base titration :  
 Ionic concentration/Ionic activity/Ionic strength/Activity coefficients/Iterations  
 Up to 3D plot [Copies of template are available from the authors.]  
 J. Chem. Educ., 68, #11, 923-926 (1991)  
 Modeling Complex Kinetics Schemes. A Computational Experiment  
 Roger S. Macomber and Ioannis Constantinides : University of Cincinnati, Cincinnati, OH 45221-0172  
 Chemical kinetics; Complex rate law; Construction of analytical model  
 Alternative incremental model(Euler's method)  
 J. Chem. Educ., 68, #11, 923-926 (1991)

表6: J. Chem. Educ. : Software に紹介のあるSERAPHIM 発行ソフト

- Volume IIIB, Number 1 ; J. Chem. Educ., 67, #3, 237-237 (1990)  
 "PIRExS" by James P. Birk : Arizona State University, Tempe, AZ 85287  
 Estimation of inorganic chemical reaction accompanied with theoretical explanations  
 "Bravais" by Phillip I. Pavlik : Northern Michigan University, Marquette, MI 49855  
 Crystal lattice calculation and display  
 Volume IIIB, Number 2 ; J. Chem. Educ., 67, #9, 770-770 (1990)  
 "Numerical Solutions for Schroedinger's Equation" by Frank Rioux : Saint John's University, Collegeville, MN  
 56321  
 Lennard-Jones 6-12 potential; Alpha-particle decay; Morse potential; Quark-antiquark interactions  
 Quick BASIC; Lotus 1-2-3 templates  
 "Pop-Up Units Converter" by Gordon Fibly and Martin Klusmann : University of Karlsruhe and Nuclear

- Research Center, 75 Karkruhe, West Germany  
 Memory-resident (TSR) program on MS-DOS  
 "ChemCalc: A Scientific Calculator" by Robert D. Allendoerfer : SUNY Buffalo, Bufflo, NY 14214-3094  
 To use ChemCalc as a Subroutine in one's own program will need BASIC.
- Volume IIIA, Number 2 ; J. Chem. Educ., 67, #11, 922-922 (1990)  
 "Bomb Calorimeter Simulation" by David J. Olney : Lexington High School, Lexington, MA 021173  
 "Hydrogen Atom Orbitals" by Michael Liebl : Mount Michael Benedictine High School, Elkhorn, NE 68022  
 "Buoyancy Programs" by Gary L. Bertrand : Univeristy of Missouri-Rolla, Rolla, MO 65401  
 Pre-laboratory exercise with the principles of bouyancy or as a simulated experiments.
- Volme IIIC, Number 1 ; J. Chem. Educ., 68, #1, 39-39 (1991)  
 "MolVib: Visualizing Molecular Vibrations" by Daniel Huber : Metrohm, Ltd., CH-9100 Herisau, Switzerland  
 Molecular vibration; Animation(choose one of molecules already provided); Center of mass;  
 Eckert(angular momentum) coordination
- Volume IVB, Number 1 ; J. Chem. Educ., 68, #3, 221-221 (1991)  
 "NOTEBOOK: A Column Calculator and Plotter" by Robert C. Rittenhouse : University of Wisconsin-Madison  
 Madison, WI 53706  
 Mini-spreadsheet; A-F x 200 entries; IBM PC  
 "SPEC 20" by Ralph W. Gable : Davidson College, Davidson, NC 28036 and James McCormick : Project  
 SERAPHIM, University of Wisconsin-Madison, Madison, WI 53706  
 Mouse either KBD maniputaed; SPECTRONIC-20 photometer
- Volume IVA, Number 1 ; J. Chem. Educ., 68, #5, 408-408 (1991)  
 "Ideal Gas" by Richard Hiatt : Brock University, St. Catharines, Ontario, Canada L2S 3A1  
 "Crystal Lattice" by Dave Trapp : Sequim High School, Sequim, Washington 98382
- Volume IIIC, Number 2 ; J. Chem. Educ., 68, #7, 587-587 (1991)  
 "Animation of an Atom-Molecular Chemical Reaction" by Douglas Kutz : University of Tennessee at  
 Chattanooga Chattanooga, TN 37403  
 Collision theory of chemical reaction (Bromine molecule and Argon atom):  
 Dissociation of bromine to bromine atom; Formation of bromine-argon complex; Non-  
 reactive scattering  
 "Grafitt" by George C. Lesensky : Beloit College, 700 College Street, Beroit, WI 53511  
 Data-manipulation tool with plotting; Useful for all chemistry curriculum; Presentative plottings;  
 2-dimensional and 3-dimensional; Least Square fitting etc.

### 表7: 市販ソフトの評価記事

- Chem 1 Concept Builder  
 Steve Lower : 7248 Ridge Dr., Burnaby, BC, V5A 1B5 Canada  
 Instructional Software; IBM or Compatible; EGA or better; 53.5-in FDs with 720KB; College and  
 Genaral Chemistry; \$440  
 J. Chem. Educ., 68, #1, A19-A20 (1991)
- SHAPE & QSHAPE  
 Eric Dowty : Shape Software, 521 Hidden Valley Road, Kingsport, TN 37663  
 IBM PC/XT/AT, PS/2; Manual and 4FDs; Advanced course; Crystal drawing; \$145
- Chem Windows  
 Softshell International, Ltd. : 2754 Compass Drive, Site 375, Grand Junction, CO 81506  
 IBM compatible; System 2; Color display; Chemical structure drawing linkable with Word Perfect;  
 \$295

- J. Chem. Educ., 68, #5, A133-A133 (1991)  
 Gene Cloning and Sequencing a Strategic Approach.  
 K. R. Smith and B. D. Hames : IRL Press at Oxford University Press  
 MS/PC-DOS v2.0 or higher; 1 3.5-in FD; College/University; Biochemistry; Genomic DNA; \$130  
 J. Chem. Educ., 68, #5, A134-A134 (1991)  
 CHEMAID: Introduction to the Periodic Table.  
 Venture Educational System : 3440 Brokenhill Street, Newbury Park, CA 91320  
 Apple II, Mac; 1 FD with teacher's guide; Grade 7 or up; Munu driven; \$49.95  
 J. Chem. Educ., 68, #6, A157-A157 (1991)  
 MacMendeleev : A Program for Exploring the Periodic Table.  
 Jon Clardy : Cornell University, Trinity Software, P.O. Box 960, Campton, NH 03223  
 Macintosh; 3D plot(some bugs); High school to graduate course; No information about price  
 J. Chem. Educ., 68, #11, A291-A292 (1991)  
 Box-B Experimental Design Software  
 Sridhar Seshdri and Stanley N. Deming : Statistical Programs, 9941 Rowbeltt, Suite 6, Houston, TX 77075  
 Macintosh; Statistics; Poor in pedagogical value; \$295

### 表 8 : その他の情報関係の記事と論文

- Careers in Chemical Information Workshop.  
 Bruce Slutsky, Library-Science Section : St. John's University, Grand Central and Utopia Parkways,  
 Jamaica, NY 11439  
 American Chemical Society Division of Chemical Information; only 1300 members out of 135000.  
 Career guidance:  
 Keynote address and overview of the field; Careers in Scientific Librarianship; Writing,  
 publishing and editing; Careers in industrial information centers; Careers in database  
 production and publishing; Working with internal databases; Patent search in an industrial  
 environment; Research at Chemicals Abstract Service.  
 J. Chem. Educ., 68, #2, 43-45 (1991)  
 An Introduction to Signal Processing in Chemical Measurement.  
 T. C. O'Haver : University of Maryland, College Park, MD 20742  
 Digital data processing:  
 Smoothing; Differentiation; Curve fitting; Fourier filtration  
 SPECTRUM:  
 Mac II; Office of Technology Liaison; Lee Bldg., Room 2114, University of Maryland,  
 College Park, MD 20742  
 [A version on IBM PC; available in 1991.]  
 J. Chem. Educ., 68, #6, A147-A150 (1991)  
 Information Sources for Organic Chemistry, 1  
 Arleen N. Somerville : Carlson Library, University of Rochester, Rochester, NY 14627  
 Chemical literacy & Searchable database:  
 Name Reaction(General sources(Chemical Abstract)); Name Reaction(Specific sources);  
 Reaction Type(General sources); Reaction Type(Specific sources)  
 Practices and Questions  
 J. Chem. Educ., 68, #7, 553-561 (1991)  
 Science Information Retrieval. A New Undergraduate Course.  
 S. V. Meschel : Roosevelt University, Chicago, IL 60606

- Cost efficiency information retrieval(computer-assisted information); Course for BS in 15 lectures with 3 home-tests; IBM XT as a terminal to the Host system with US Robotic modem
- J. Chem. Educ., 68, #7, 562-565
- Alternative Approaches to Teaching Chemical Information Retrieval.
- George Gorin : Oklahoma State University, Stillwater, OK 74078
- CA ONLINE with several practical exercises in 12 weeks
- J. Chem. Educ., 68, #9, 757-759
- A Chemistry Degree Program with Computer Science Emphasis.
- G. L. Breneman : Eastrn Washington University, Cheney, WA 99004
- 105 quarter credit hours(Normal BS programs require 93 quarter credit hours)
- Computer science emphasis :
- Chemistry ; General(15)/Qualitative(6)/Organic(8)/OCLabo(2)/Physical(7)/PCLabo(3)
- Compt. Sci.; Structured Prgm(10)/Data Struc(4)/Assembly Prgm(5)/Microassembly Lang(4)
- Physics ; General(12)/Instrmnt.Labo(3)/Digital Logic(3)/Microprocessors(4)
- Mathematics ; Single variable calculus(10)/Multivariable calculus(5)
- Technology ; Microcomputer Graphics(4)
- Also contains a list of Physical Chemistry Labo programs
- J. Chem.Educ., 68, #10, 832-834 (1991)
- Molecular Mechanics in the Undergraduate Curriculum.
- Ronald R. Souers : The State University of New Jersey, New Brunswick, NJ 08903
- Organic chemistry course; Mainflame connection with account; Two 80-min lectures; Electronic mail file transfer with reply
- Programs:
- PCMODEL(IBM,MAC-II); Chem3D Plus(Macintosh-II)
- MacroModel 2.5/ QCPE / Model 2.94 ; all for mainflame
- J. Chem. Educ., 68, #10, 816-818 (1991)