

## 串珠分子模型與晶體結構

- 國立臺灣大學化學系，大學普通化學實驗，第十二版，國立臺灣大學出版中心：台北，民國九十七年。
- 版權所有，若需轉載請先徵得同意；疏漏之處，敬請指正。
- 臺大化學系普化教學組李健源助教（2008.03.05）。

一、目的：以各色串珠及隨意貼黏土組成分子模型及固體之晶體結構，瞭解物質三度空間之立體配置。

二、實驗技能：學習觀察預測角度及物體的三度空間配置等技能。

三、原理：

(一) 分子形狀

具有極性化學鍵之分子，其分子形狀決定分子是否具有極性，進而影響分子間作用力及沸點、表面張力、汽化熱與溶解度等性質。而利用路易斯電子點式及價殼層電子對互斥理論（Valence Shell Electron Pair Repulsion, VSEPR）可以預測分子形狀及其性質。例如：甲烷（ $\text{CH}_4$ ）分子，中心碳原子以  $sp^3$  混成軌域之四個價電子與四個氫原子的  $1s$  軌域價電子形成四個共價鍵，因此碳原子外圍有四對電子對，形成鍵角為  $109.5^\circ$  之四面體形非極性分子。本實驗以手工藝用串珠作為硬球模型之原子，隨意貼黏土為化學鍵，黏組成類似空間填充模型（space-filling model），藉以瞭解分子的立體形狀與極性關係，實驗流程如圖 1。

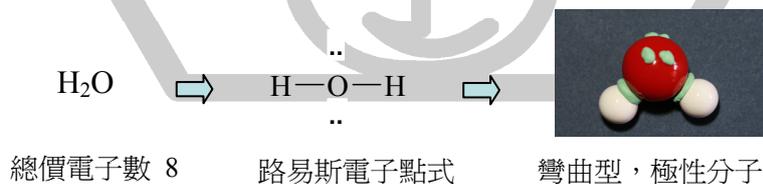


圖 1 預測分子形狀流程圖

(二) 晶體結構

晶形固體（crystalline solid）之組成粒子在空間整齊排列，使其具有各自特別的晶體結構與形狀。此晶體結構與組成粒子排列的緊密程度，會影響物質熔點、密度、延展性等性質。以立方晶系（cubic system）為例，有簡單立方（simple cubic）、體心立方（body-centered cubic）及面心立方

(face-centered cubic, fcc)。排列的方式不同，粒子的配位數 (coordination number, 每原子鄰接之原子數)、單位晶胞 (unit cell) 中所含粒子數及填充緊密度 (packing efficiency) 均不相同。晶體結構中，單層晶格點排列的情形可如圖 2 所示。圖 2(A) 中每一個代表晶格點之圓球配位數為 4，晶格點間之空隙較大。圖 2(B) 中第二列粒子排列在第一列相鄰兩個粒子之空隙間 (dimple)，排列較緊密，每一圓球的配位數為 6，這樣的排列方式稱為最密堆積 (closest packing)。最密堆積依層與層排列的差異又分為兩種。若如圖 3(B) 為 ABAB... 二層重複疊排，則為六方最密堆積 (hexagonal closest packing, hcp)。若如圖 3(C) 為 ABCABC... 三層重複疊排，則為立方最密堆積 (cubic closest packing, ccp) 或稱面心立方。致於離子性固體，一般是較大的離子 (通常為陰離子，以  $r_-$  表示) 以最密堆積的形式排列，然後半徑較小的離子 (通常為陽離子，以  $r_+$  表示) 依離子半徑比 ( $r_+/r_-$ ) 安置於較大離子之空隙間，如四面體洞 (tetrahedral hole)、八面體洞 (octahedral hole) 或立方體洞 (cubic hole) 中，使陽離子與陰離子間之吸引力為最大、排斥力為最小的狀態。以 NaCl 為例，氯離子以面心立方晶形排列，鈉離子位於八面體洞。本實驗將以串珠代表晶體結構中各晶格點的原子、分子或離子，黏組堆疊各式晶體模型，觀察其立體排列情形。

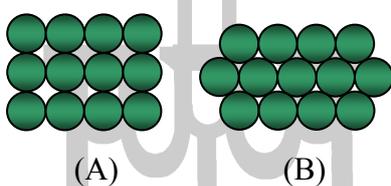


圖 2 晶格中粒子規則排列

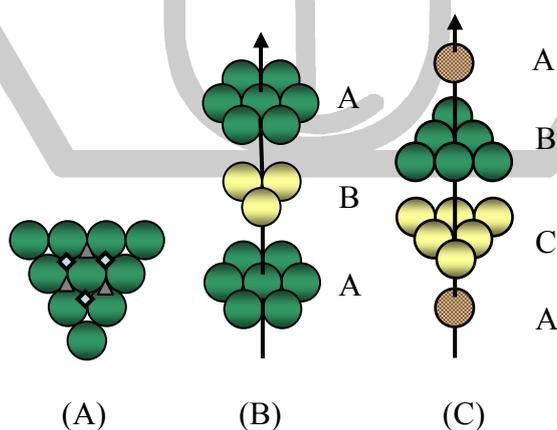


圖 3 (A)最密排列，(B)六方最密堆積，(C)立方最密堆積

四、儀器與材料：分子模型教具一盒 (各顏色串珠及隨意貼黏土)、色紙一張 (可自備)、數位相機 (自備，公用 4 台；自備隨身碟)。

## 五、實驗步驟：

步驟		示範																																
1	<p>檢查分子模型教具盒中各顏色串珠數目及隨意貼黏土，數量不足者先補齊。</p> <p>黑球：代表碳原子 C，14 顆            白球：代表氫原子 H，16 顆            紅球：代表氧原子 O，6 顆            藍球：代表氮原子 N，6 顆            綠球：代表氯原子 Cl，6 顆            其他：8 顆            隨意貼黏土數塊</p>																																	
(一) 分子形狀																																		
2	<p>完成表 1 所列各分子或離子的路易斯電子點式，依 VSEPR 理論預測其分子形狀、鍵角及中心原子之鍵結軌域。</p>	<p>表 1 分子或離子之路易斯電子點式與形狀            本表格電子檔可上網下載 (<a href="http://www.ch.ntu.edu.tw/~genchem99/g2.htm">http://www.ch.ntu.edu.tw/~genchem99/g2.htm</a>)</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>分子</th> <th>CS<sub>2</sub></th> <th>BCl<sub>3</sub></th> <th>SO<sub>2</sub></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>路易斯電子點式</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>預測形狀及鍵角</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>中心原子鍵結軌域</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table> <table border="1"> <thead> <tr> <th>分子</th> <th>CCl<sub>4</sub></th> <th>PBr<sub>3</sub></th> <th>OF<sub>2</sub></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>路易斯電子點式</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>預測形狀及鍵角</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>中心原子鍵結軌域</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	分子	CS <sub>2</sub>	BCl <sub>3</sub>	SO <sub>2</sub>	路易斯電子點式				預測形狀及鍵角				中心原子鍵結軌域				分子	CCl <sub>4</sub>	PBr <sub>3</sub>	OF <sub>2</sub>	路易斯電子點式				預測形狀及鍵角				中心原子鍵結軌域			
分子	CS <sub>2</sub>	BCl <sub>3</sub>	SO <sub>2</sub>																															
路易斯電子點式																																		
預測形狀及鍵角																																		
中心原子鍵結軌域																																		
分子	CCl <sub>4</sub>	PBr <sub>3</sub>	OF <sub>2</sub>																															
路易斯電子點式																																		
預測形狀及鍵角																																		
中心原子鍵結軌域																																		
3	<p>以分子模型盒中各色串珠代表原子，隨意貼黏土作為化學鍵，將串珠黏組成具有正確鍵角的分子模型，以數位相機記錄所組成之分子並判斷是否具有極性。</p>	 <p>蹺蹺板型，極性</p>																																
(二) 晶體結構																																		
4	<p>立方晶系            以相同大小的色球為原子，依表 2 黏組成簡單立方、體心立方、面心立方晶體堆積，照相記錄其形狀、觀察其堆積的緊密度、三度空間立體排列及配位數，同時計算每單位晶胞中所含原子數。</p>	 <p>體心立方</p>																																

	<p>最密堆積</p> <p>依表 2 及參考圖 3 黏組晶體結構中之六方最密堆積(右上圖)及立方最密堆積(右下圖), 並照相記錄。同時, 轉動所組成之立方最密堆積, 找出最適合角度, 觀察其面心立方之晶體結構。</p> <p>5</p>	
	<p>離子性固體</p> <p>6 參照表 2, 黏組及觀察晶體模型之四面體洞、八面體洞及立方體洞之位置。</p>	