

實驗 29-2 有機分子模型

國立台灣大學化學系普化教學組 2010/4/7 修訂

一、目的：學習以有機分子模型組 MOLYMOD[®] 組成有機分子之球-棍模型，以觀察並瞭解物質的立體空間配置。

二、原理：

(一) 有機化合物

有機化合物是指含碳化合物（一氧化碳、二氧化碳、碳酸、碳酸鹽、金屬碳化物、氰化物除外）或碳氫化合物（烴類）之衍生物。由於碳具有四個價電子，可以 sp^3 、 sp^2 、 sp 各種混成軌域，與其他原子形成單鍵、雙鍵、環狀等各種結構類型的化合物。有機化合物常具有同分異構物（isomers），即分子式相同結構式不同的物質；大分為結構異構物（structural isomers）與立體異構物（stereoisomers）二類。利用分子之球-棍模型可清楚的瞭解分子中各原子的配置情形。

(二) 結構異構物

結構異構物是指分子式相同但原子連接方式不同的物質。例如圖 1 之正戊烷、2-甲基丁烷及 2,2-二甲基丙烷，三者之分子式均為 C_5H_{12} ，但原子連接方式不同、性質各異，是屬於結構異構物。

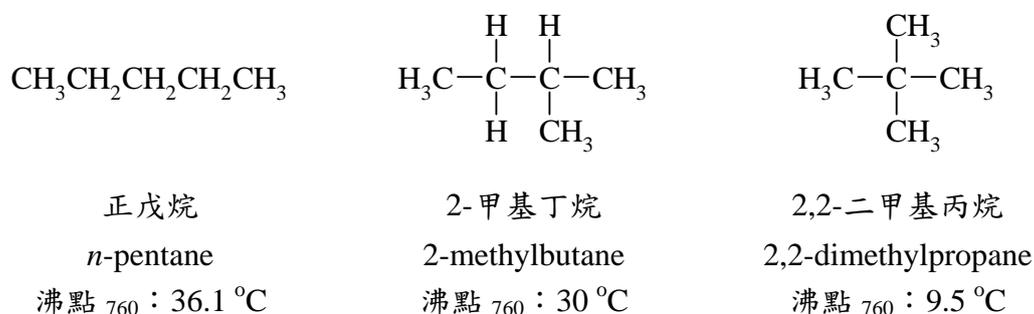


圖 1 戊烷之結構異構物

(三) 鏈烴之順反異構物

碳氫化合物具有不飽和雙鍵者，例如乙烯分子（ethene, $H_2C=CH_2$ ），碳原子

間以 sp^2 混成軌域鍵結，鍵角為 120° 。由於雙鍵不能旋轉，雙鍵所連接的二個碳原子上具有不同的取代基團時，會有順反異構物 (cis-trans isomers) 出現，又稱幾何異構物 (geometric isomers)，是屬於立體異構物之一種。例如 1,2-二氯乙烯 (1,2-dichloroethene, $\text{CHCl}=\text{CHCl}$)，若二個氯原子位於雙鍵的異側，稱為反-1,2-二氯乙烯 (正常沸點為 47.2°C)；若二個氯原子位於雙鍵的同側，稱為順-1,2-二氯乙烯 (正常沸點為 60°C)。反式 1,2-二氯乙烯為非極性分子，分子間之作用力為倫敦分散力 (London dispersion forces)；順式分子具有極性，分子間除了分散力之外，尚有偶極/偶極作用力，以致沸點較反式高。

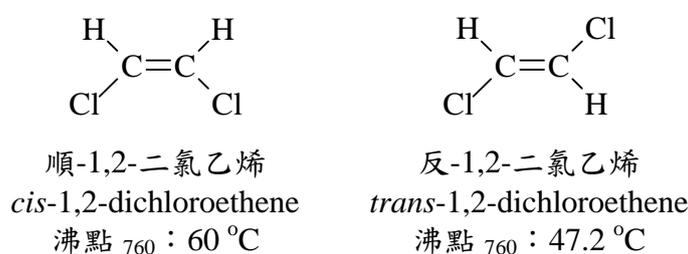


圖 2 1,2-二氯乙烯之順反異構物

(四) 環烴之順反異構物與構形

碳氫化合物經由碳原子的連結成為環形者，稱為環烴 (cyclic hydrocarbons)。環烴若有二或多個取代基在環上，當取代基位於環的同側或異側時，也會有順反異構物存在。此外，有機分子由於單鍵可旋轉會造成三度空間相對位置之變化。以環己烷為例，碳原子以 sp^3 混成軌域鍵結，鍵角為 109.5° 。環己烷分子因單鍵旋轉，具有最為人熟知的船型 (boat form) 及椅型 (chair form) 二種構形 (conformations)，如圖 4 所示。椅型分子較船型的能量低，室溫時，約 99.99% 之環己烷是以椅型存在。



圖 4 環己烷之構形

(五) 鏡像異構物

甲烷之碳原子所連接的四個氫原子，若替換為四種不同之取代基，則此分子和它的鏡像 (mirror image) 無法完全重疊 (nonsuperimposed)，此二物質稱為鏡像異構物 (enantiomers)；具鏡像異構物之物質，又稱為手性分子 (chiral molecule)，宛如你的右手是左手的鏡像，二者無法完全重疊。此具有四個不同取代基之碳原子稱為手性碳 (chiral carbon，常以 C^* 標示之)。鏡像異構物具有相似的物理與化學性質，並且可讓平面偏極光 (plane-polarized light) 旋轉，是一種光學異構物，亦歸屬於立體異構物。鏡像異構物中之一若讓偏極光順時鐘旋轉，稱為具右旋光性 (dextrorotatory)，以 (+) 或 *d*-表示；它的鏡像分子則讓偏極光逆時鐘旋轉，稱為左旋光性 (levorotatory)，以 (-) 或 *l*-表示，二者旋轉的角度相同但方向相反，如圖 3 所示。

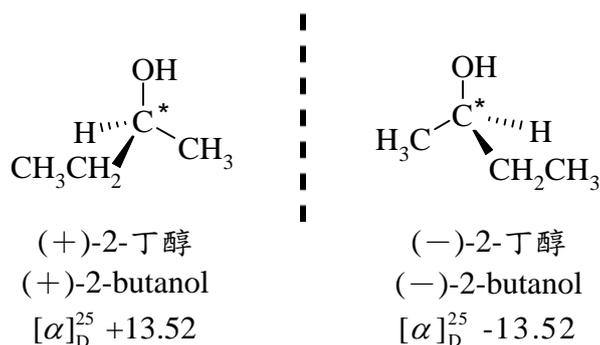


圖 3 2-丁醇之鏡像異構物

生物體內有許多物質因為結構上的微小差異而具有不同的生物活性，例如前實驗中提及的維生素 C，天然的維生素 C 即是具有右旋光性的物質。由於物質之形狀與三度空間的立體結構影響物質之性質甚巨，本實驗將以有機分子模型組 MOLYMOD[®] 組成有機分子的球-棍模型，以觀察物質的立體空間配置。

三、儀器與材料：

MOLYMOD[®] 有機分子模型組一盒、自備數位相機及隨身碟。

四、實驗步驟：

1. 領取 MOLYMOD[®] 有機分子模型組一盒，並清點原子數量。

2. 畫出丁烯 (C_4H_8) 之結構異構物；指出何者具有順反異構物。以有機分子模型組組成各分子之球-棍模型，並以數位相機記錄比較之。
3. 畫出氯丁烷 (C_4H_9Cl) 之結構異構物；指出何者具有鏡像異構物。以有機分子模型組組成各分子之球-棍模型，並以數位相機記錄比較之。
4. 畫出 1,4-二甲基環己烷 (1,4-dimethylcyclohexane, $(CH_3)_2C_6H_{10}$) 的順反異構物。
5. 畫出順-1,4-二甲基環己烷之船型及椅型二種構形分子。以有機分子模型組組成球-棍模型，並以數位相機記錄比較之。若考慮原子在空間位置之擁擠程度，試指出二種構形何者較為穩定。
6. 草酸根 (oxalate, $^{2-}O_2C-CO_2^{-}$) 及乙二胺 (ethylenediamine, $H_2NCH_2CH_2NH_2$) 是錯合反應中常用的雙牙配位基 (bidentate)，試畫出它們的路易斯結構式，組成其有機分子模型，並觀察記錄其分子形狀。
7. 實驗結束後，拆解分子模型並分類整理，清點數量後交還給助教。

五、參考資料：

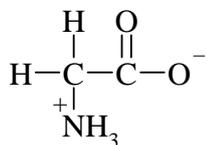
1. Zumdahl, S. S. *Chemical Principles*; 6th ed., Houghton Mifflin Co.: New York, 2009.
2. Brown, W. H. *Introduction to Organic Chemistry*; 2nd ed., Saunders College Publishing: New York, 2000.

5. 草酸及乙二胺的路易斯結構式，及球-棍模型：

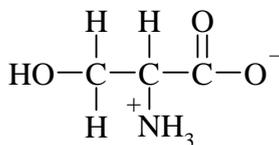
二、問題與討論：

1. 依據分子的形狀與極性，預測丁烯的結構異構物中何者的正常沸點最高？試由 The Merck Index 查出這些異構物之沸點最高，印證你的預測。

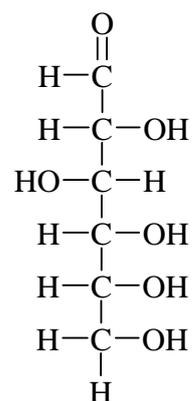
2. 胺基酸是組成蛋白質的單體，下列胺基酸何者具有鏡像異構物？葡萄糖是組成澱粉的單體，其分子中何者為手性碳？試標示之。



甘胺酸 (glycine)



絲胺酸 (serine)



葡萄糖