

有機分子模型

- 國立臺灣大學化學系，大學普通化學實驗第 16 版，國立臺灣大學化學系：台北，民國 113 年。
- 版權所有，若需轉載請先徵得同意；疏漏之處，敬請指正。
- 國立台灣大學化學系普化教學組，楊禮嘉助教（2011.08）、余瑞琳講師（2024.09）。

一、目的：學習以 MOLYMOD[®]模型組裝有機分子之球-棍模型，並運用電腦模擬軟體繪製分子結構，瞭解組成原子在分子內之立體空間配置與相對能量之關係。

二、實驗技能：學習組裝分子之球-棍模型及操作分子模擬與繪圖軟體。

三、原理：

（一）有機化合物

有機化合物是指含碳之化合物（一氧化碳、二氧化碳、碳酸、碳酸鹽、金屬碳化物及氰化物等除外）或碳氫化合物之衍生物。由於碳原子具有四個價電子（valence electrons），可以 sp^3 、 sp^2 、 sp 各種混成軌域（hybrid orbital）與其他原子形成單鍵、雙鍵、參鍵或環狀等各種結構類型的化合物⁽¹⁾。也有些有機化合物雖然組成的原子相同、具有相同的分子式，但結構不同，而有同分異構物（isomers）存在；同分異構物又可分為結構異構物（structural isomers）與立體異構物（stereoisomers）二類。

（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，如圖 1 中之正戊烷、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。

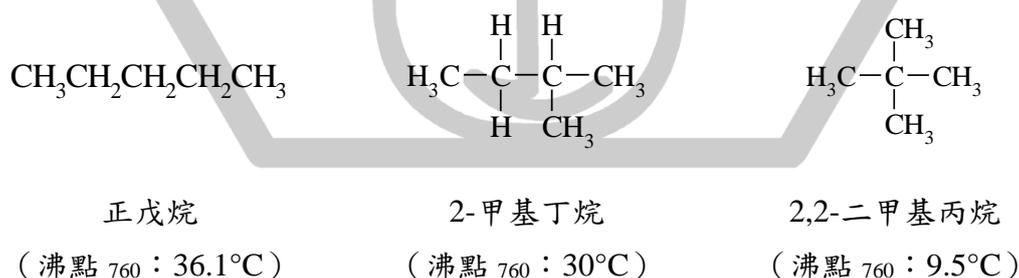


圖 1 C_5H_{12} 之結構異構物

（三）立體異構物

另有一類同分異構物，各原子間連接方式相同，但是原子的三度空間排列不同，稱為立體異構物。立體異構物通常分為順反異構物（*cis-trans* isomers）及鏡像異構物（*enantiomers*）。

1. 順反異構物

碳氫化合物具有不飽和雙鍵 (C=C) 者，稱為烯類 (alkenes)，如乙烯分子 (ethene, $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$)，碳原子間以 sp^2 混成軌域鍵結，鍵角為 120° 。由於 π 鍵限制了雙鍵的旋轉及原子間的相對位置，雙鍵所連接的二個碳原子上具有不同的取代基時，會有順反異構物 (舊稱幾何異構物, geometric isomers)。如圖 18-2 之 1,2-二氯乙烯 (1,2-dichloroethene)，當二個氯原子位於雙鍵的異側，稱反-1,2-二氯乙烯；二個氯原子若位於雙鍵的同側，稱順-1,2-二氯乙烯。環烴 (cyclic hydrocarbon) 分子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。



圖 18-2 1,2-二氯乙烯之順反異構物

2. 鏡像異構物

有機分子之碳原子若連接四種不同的原子或基團時，此碳原子稱為手性碳 (chiral carbon, 常以 C^* 標示之)。含手性碳之分子和它的鏡像 (mirror image) 無法完全重疊 (nonsuperimposable)，稱為鏡像異構物。鏡像異構物具有幾乎完全相同的物理與化學性質，但讓平面偏極光 (plane-polarized light) 朝相反方向旋轉，又稱光學異構物 (optical isomers)。如圖 3 之 2-丁醇是具光學活性的鏡像分子，分子中手性碳的絕對組態以 (R)-或 (S)-表示；旋光性則需要實際量測，無法由分子結構判斷。若分子讓平面偏極光順時針旋轉者，稱右旋光性 (dextrorotatory)，以 (+) 或 *d*-表示；其鏡像異構物則會讓平面偏極光逆時針旋轉，稱左旋光性 (levorotatory)，以 (-) 或 *l*-表示；二者旋轉角度相同但方向相反。

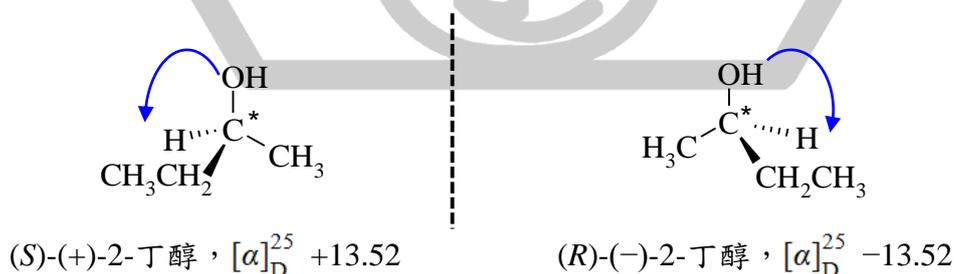


圖 3 2-丁醇鏡像異構物之實測比旋光度

1. (R)-：手性碳取代基優先序列為順時針
2. (S)-：手性碳取代基優先序列為逆時針
3. $[\alpha]_{\text{D}}^{25}$ 比旋光度：於 25°C 以鈉光 D 線測定

(四) 構形異構物 (conformer)

由於單鍵可旋轉會造成分子內原子三度空間相對位置之變化，此稱為構形異構物。以環己烷 (C_6H_{12}) 為例，碳原子間以 sp^3 混成軌域鍵結形成鍵角約為 109° 之六員環。環己烷分子因單鍵旋轉，具有最為人所熟知的船型 (boat form) 及椅型 (chair form) 二種構形，如圖 4 所示。椅型分子較船型分子能量低，室溫時，約 99.99% 之環己烷是以椅型存在。



圖 4 環己烷之構形

生物體內有許多物質僅因結構上空間排列差異而具有不同的生物活性，如維生素 C 是具有右旋光性的物質。由於物質之形狀與三度空間立體結構影響物質之性質甚鉅，本實驗將以 MOLYMOD[®] 模型組裝有機分子的球-棍模型，並學習以電腦分子模擬軟體繪製其結構及計算鍵角與鍵長，觀察分子的立體空間配置。

四、儀器與材料：

MOLYMOD[®] 模型組一盒、筆記型電腦、平板或數位相機 (自備)。

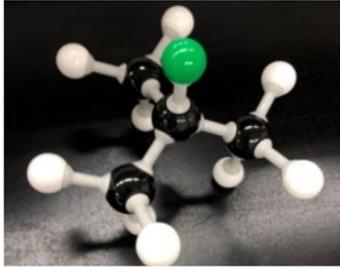
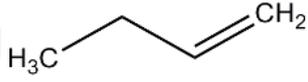
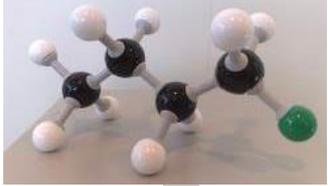
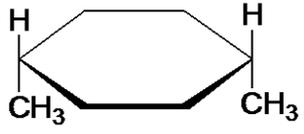
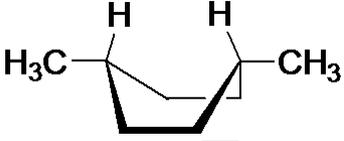
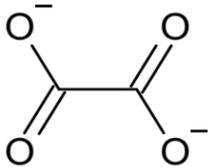
免費分子模擬軟體 (可先下載安裝)：

Avogadro: <http://avogadro.cc>

Chemsketch: <http://www.acdlabs.com/resources/freeware/>

五、實驗步驟：

步驟		圖例						
1.	參考有機分子模型實驗結果之表單，於預習報告完成筆繪各分子之結構式及/或系統命名。	<p>實驗十八、有機分子模型</p> <p>一、實驗結果</p> <p>1. 丁烯 (C_4H_8) 鏈型之結構異構物及順反異構物。</p> <table border="1"><thead><tr><th>中文系統命名 (化學命名原則)</th><th>1-丁烯</th><th>反-2-丁烯</th></tr></thead><tbody><tr><th>英文系統命名 (IUPAC 命名法則)</th><td>But-1-ene</td><td>trans-But-2-ene</td></tr></tbody></table>	中文系統命名 (化學命名原則)	1-丁烯	反-2-丁烯	英文系統命名 (IUPAC 命名法則)	But-1-ene	trans-But-2-ene
中文系統命名 (化學命名原則)	1-丁烯	反-2-丁烯						
英文系統命名 (IUPAC 命名法則)	But-1-ene	trans-But-2-ene						
2.	領取 MOLYMOD [®] 模型組一盒並清點球與棍之數量，若有缺漏先補齊。							

3.	<p>(1) 以 MOLYMOD[®]模型組裝各分子之球-棍模型，並以數位相機拍照、記錄、比較之。</p> <p>(2) 以 Chems sketch 繪製各分子之結構式；Avogadro 繪製球-棍模型、空間填充模型，觀察與旋轉其結構及計算鍵角與鍵長（選作）。</p> <p>註：可自行安裝軟體於個人電腦，完成結構繪製與計算，再將各分子圖形合併至實驗報告中。</p>							
4.	繪出並組裝 C ₄ H ₈ 鏈烴之異構物；指出何者具有順反異構物。							
5.	繪出並組裝 C ₄ H ₉ Cl 之異構物；指出何者具有鏡像異構物。							
6.	繪出並組裝 1,4-二甲基環己烷 (1,4-dimethylcyclohexane, (CH ₃) ₂ C ₆ H ₁₀) 之順反異構物。							
7.	繪出並組裝順-1,4-二甲基環己烷之船型及椅型二種構形分子。依據原子在空間位置之擁擠程度，指出二種構形何者較為穩定。							
8.	草酸根離子 (oxalate, ⁻ O ₂ C ₂ O ₂ ⁻) 及乙二胺分子 (ethylenediamine, H ₂ NCH ₂ CH ₂ NH ₂) 是錯合反應中常用的二牙配位子 (bidentate ligand)。繪出並組裝分子模型，觀察記錄其分子形狀。							
9.	實驗結束後，拆解分子模型並分類整理，清點各色球及棍之數量後交還給助教。	<p>白球：20 顆 綠球：4 顆 黑球：12 顆 黃球：2 顆 紅球：6 顆 灰球：1 顆 藍球：4 顆 紫球：1 顆</p> <p>白色短鍵：26 個 灰色短鍵：26 個 灰色長鍵：12 個</p> <p>塑膠扳手：1 支</p>						
10.	將組裝所得各分子結構圖檔整理於實驗報告電子檔中，並上傳至 NTUCOOL 作業區。	<table border="1" data-bbox="1062 1727 1358 1957"> <tbody> <tr> <td>Systematic name</td> <td>1-Butene</td> </tr> <tr> <td>Structural formula</td> <td></td> </tr> <tr> <td>MOLYMOD[®] Ball-and-stick model</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>	Systematic name	1-Butene	Structural formula		MOLYMOD [®] Ball-and-stick model	
Systematic name	1-Butene							
Structural formula								
MOLYMOD [®] Ball-and-stick model								