



E29 分子模型與晶體結構

(2012/02/15 修訂)

領取專用器材：

■ 分子模型教具一盒 (檢查盒中各顏色串珠數目)

- 黑球: 14顆 白球: 16顆
- 紅球: 6顆 藍球: 6顆
- 綠球: 6顆 其他: 8顆
- 隨意貼黏土

■ 四台公用數位相機可借用 (洽助教登記借用)

準備個人器材：

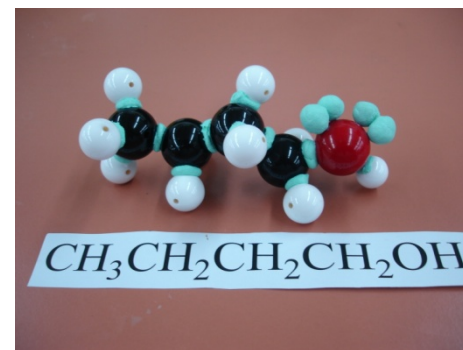
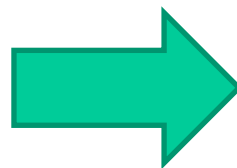
- 數位相機
- 隨身碟
- 色紙一張





實驗目的

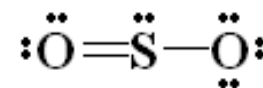
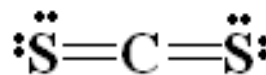
- 以各色串珠及隨意貼黏土組成分子模型及固體之晶體結構
- 瞭解物質三度空間之立體配置





原理I：分子形狀與性質

- 分子型物質：分子間作用力影響其性質
 - 分子間作用力大：飽和蒸汽壓低，沸點高，汽化熱大，臨界溫度高...
- 分子間作用力
 - 非極性分子：分散力
 - 極性分子：分散力、偶極-偶極作用力
- 分子之極性
 - 極性共價鍵
 - 分子形狀
- 分子形狀
 - 路易斯結構式
 - 電子對互斥理論



CS_2 ：直線形非極性， SO_2 ：彎曲形極性



原理II：預測分子型物質之形狀

- 畫路易斯電子點式 (含孤電子對)
- 配合價殼層電子對互斥理論 (VSEPR)
- 預測分子形狀

■ 黏組成似填充型分子模型

■ 瞭解分子的立 SCl_2 形式與性關係



中心原子電子對形狀：四面體形

SCl_2 彎曲形極性分子

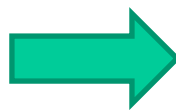
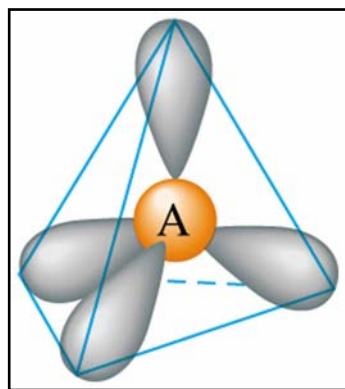
- 計算總價電子數
- 原子間以單鍵連接
- 周圍原子先滿足八隅體
- 剩餘電子放在中心原子上
- 中心原子符合八隅體
- 中心原子不足八隅體時，試以多鍵

- 決定配位形狀(鍵&孤對電子對)
- 未鍵結電子對斥力大於鍵結電子對
- 決定分子形狀
- 依據鍵的極性及分子形狀
- 預測分子極性

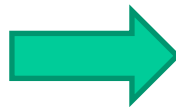
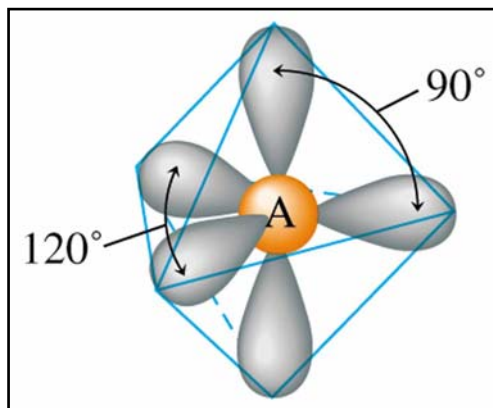


範例

- 4 對電子 (四面體)



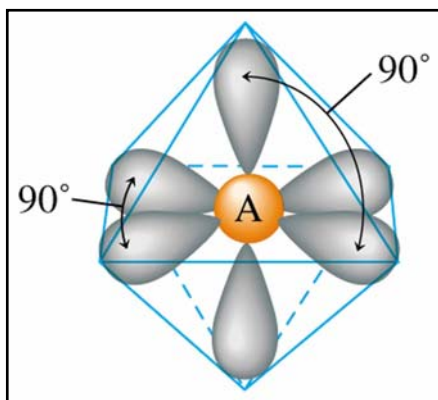
- 5 對電子 (雙三角錐)





範例

- 6 對電子 (八面體)



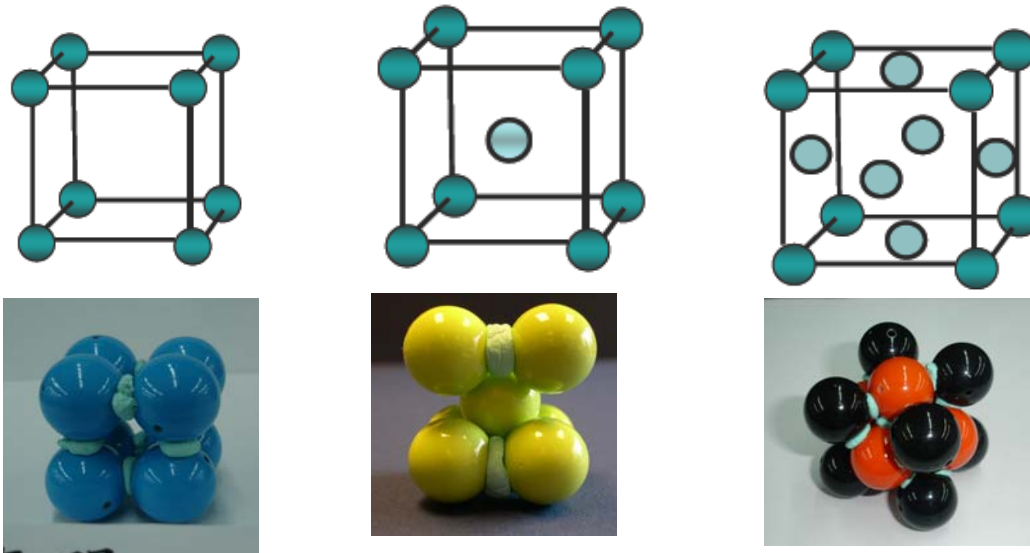
圖片來源：Zumdahl, S. S. *CHEMICAL PRINCIPLES* 5th Ed.;
Houghton Mifflin Co.: Boston, 2005.



原理III：晶體結構與性質

- 晶形固體：組成之粒子在空間重複規則排列
- 晶體排列方式影響物質熔點、密度、延展性等
- 7大晶系、14布拉維斯晶格（Bravais lattices）

http://en.wikipedia.org/wiki/Crystal_system



簡單立方

體心立方

面心立方

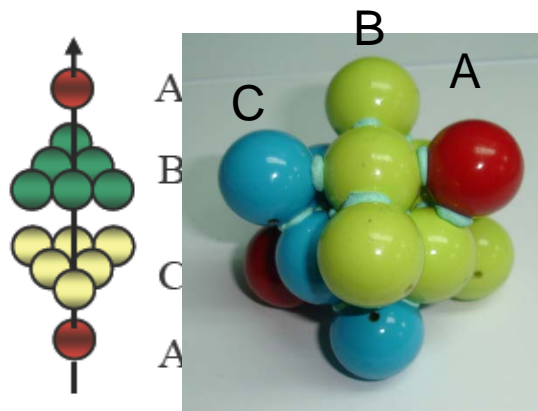


晶體結構

- 晶體結構
 - 配位數：鄰接原子數
 - 最密堆積：六方最密堆積、立方最密堆積
- 離子型晶體
 - R_+/r_- : 0.2~0.4 四面體洞
 - R_+/r_- : 0.4~0.7 八面體洞
 - R_+/r_- : > 0.7 立方體洞



體心立方



立方最密堆積
(面心立方)



四面體洞



實驗流程

(一) 分子形狀

確認並補齊分子模型盒
中各顏色的串珠數量



完成表29-1的預測形狀
黏組分子模型



拍照記錄



(二) 晶體結構

依表29-2與圖29-3完成晶體模型



觀察並拍照記錄



結束並整理模型盒

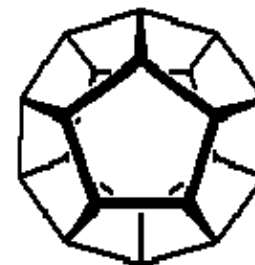


注意事項

- 實驗講桌有一盒組裝範例參考（立方最密堆積）
- 課前先完成表29-1分子結構預測
- 實驗課中再利用串珠建構出其分子模型
- 建構完分子的模型後立即拍照，即可拆掉進行下一分子模型的建構
- 實驗結束隨意貼黏土請勿隨意丟棄，可重複使用
- 再次確認補齊教具盒中各顏色串珠的數目
- 數位相機，清除檔案，歸還，檢查補充電池



選作實驗：C₂₀串珠分子



12個五邊形



- 每一珠代表一sp²軌域
- 三珠連接點為C原子

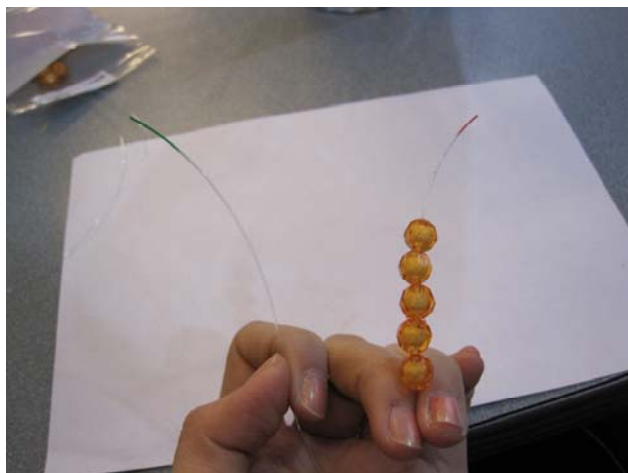
金必耀，莊宸，左家靜：串珠分子模型的美妙世界

http://proj3.sinica.edu.tw/~chem/servxx6/files/paper_2742_1231482907.pdf

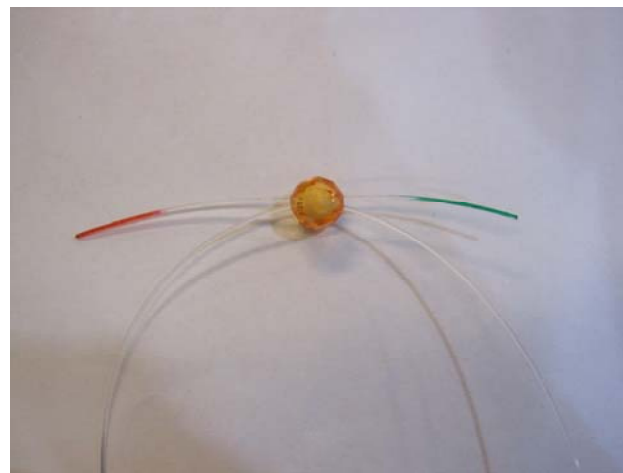


C_{20} 串珠分子模型(30珠1米線)

1. 右手串珠



2. 左手穿孔交叉成環



3. 保持5珠環(4+1, 2+3..)



4. 逢3珠串連

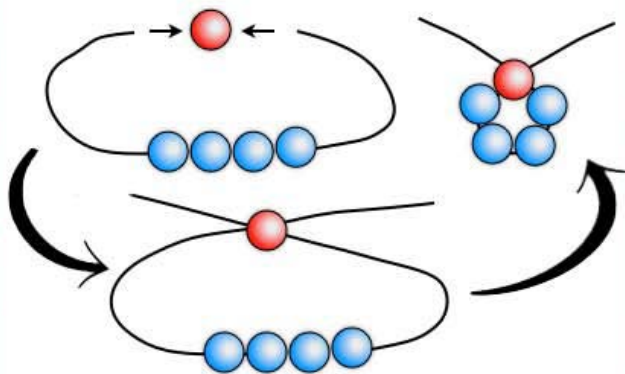




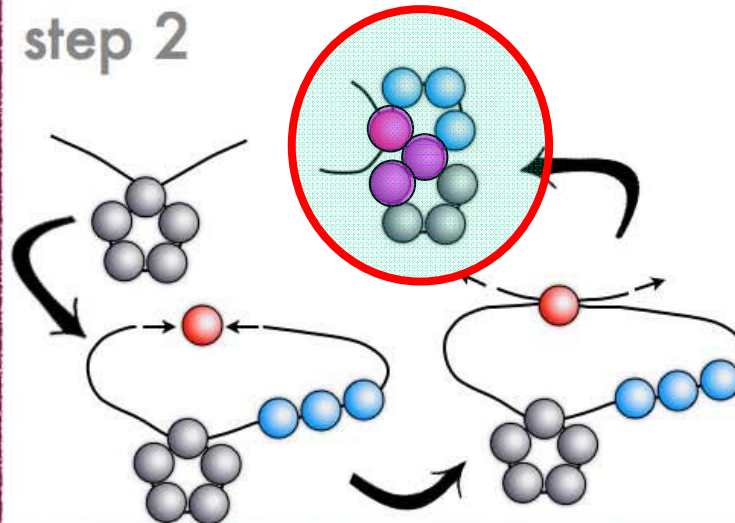
示意圖

5 珠環於線中央

step 1

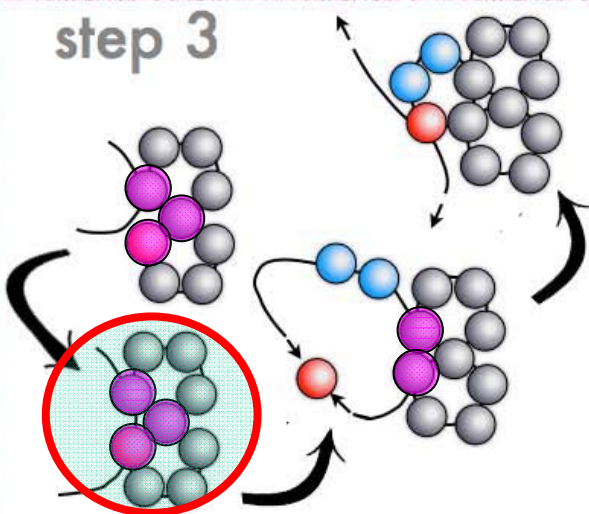


step 2

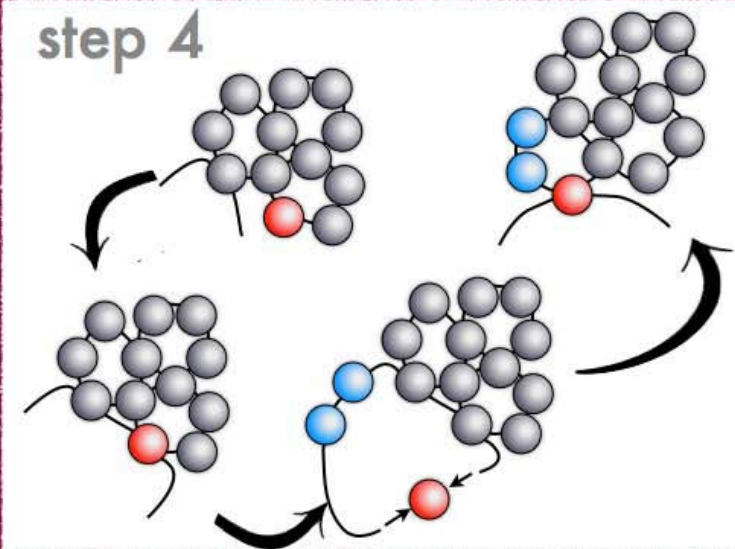


均為 5 珠環

step 3



step 4



鄰逢 3 珠串連