



有機分子模型

2025/02/06修訂

- 本次實驗不必穿實驗衣及戴護目鏡
- 自備數位相機、筆電、手機或隨身碟
- 筆電可先下載 Avogadro 及 Chems sketch (選作實驗)

領取專用器材：領取後即清點

- MOLYMOLD 有機分子模型教具一盒

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

白色短鍵：26個 / 10.13 g

灰色短鍵：26個 / 23.11 g

灰色長鍵：12個 / 9.95 g

塑膠扳手：1支





實驗目的

- 瞭解有機分子三度空間立體配置
- 以MOLYMOLD[®]有機分子模型組裝
 - 球-棍模型
 - 觀察：分子的構形
 - 觀察：同分異構物，特別是鏡像異構物
- 學習使用化學繪圖軟體（選作）
 - Chems sketch
 - Avogadro

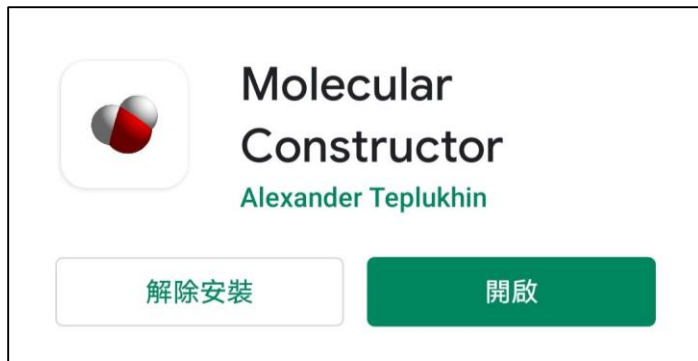
✓ Chems sketch: <http://www.youtube.com/watch?v=5kaU5iEqifQ>

✓ Avogadro: <http://www.youtube.com/watch?v=ohdMhGaaP68>

Calculate bond-angle, bond-length, and bond energy



手機APP輔助



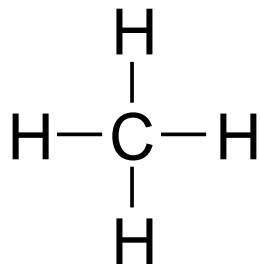
1. 加入主要原子
2. 加上鍵結
3. 補氫原子
4. Shaping

C_4H_8 / 56.108, atoms 12, bonds 11
You can rotate the view to see the double bond better. Now select Tools -> Add hydrogens
Energy: 1.043985
Max fluctuation: 0.25

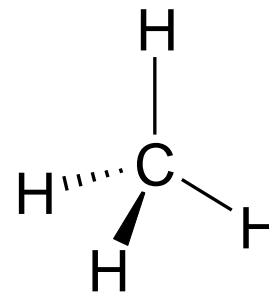


分子形狀

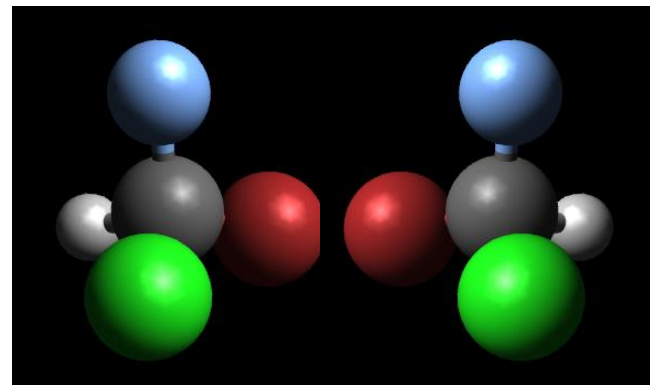
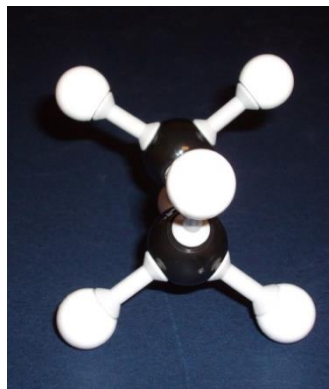
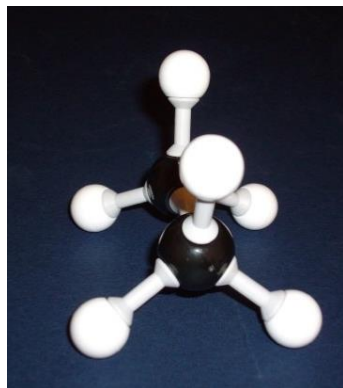
- 路易斯結構式



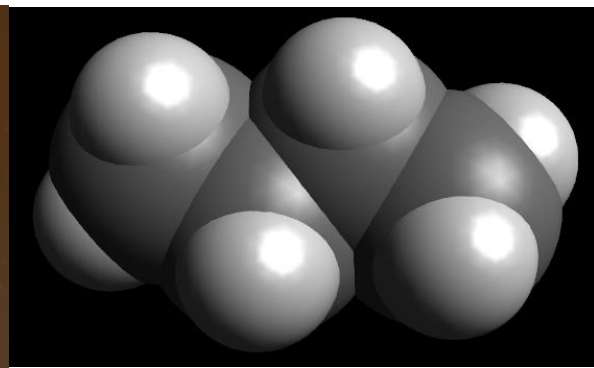
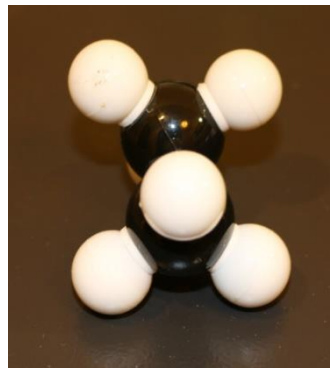
- 楔形表示法



- 球-棍模型

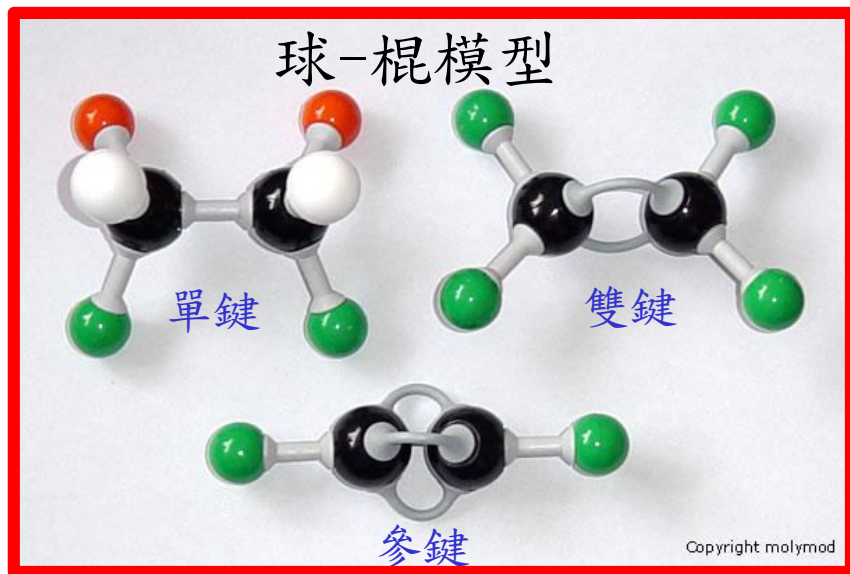


- 空間填充模型





MOLYMOLD®有機分子模型



單鍵 多鍵

碳	
氫	
氧	
氮	
氯	

特定色球代表之原子





實驗流程：組裝有機分子模型

MOLYMOD 有機分子球-棍模型

確認並補齊有機分子模型
盒中各色球及棍鍵數量



課前完成有機分子結構式



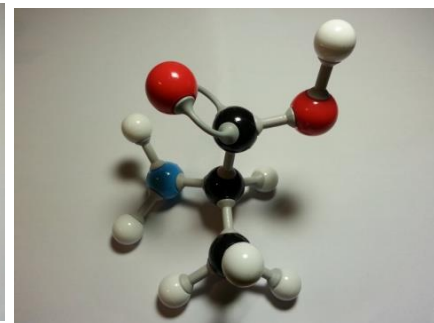
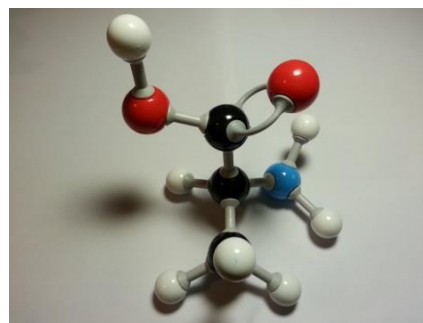
組裝有機分子球-棍模型



觀察並拍照記錄



結束並整理模型盒



球-棍模型

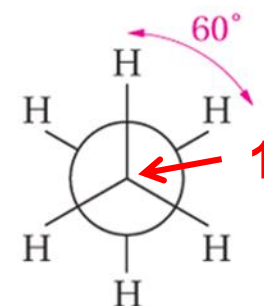
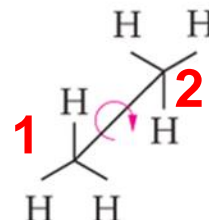
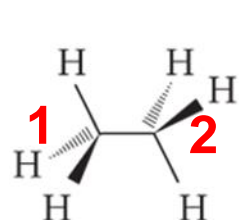
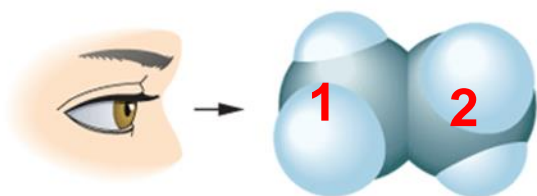


紐曼投影式

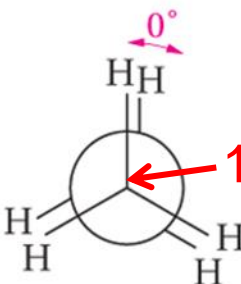
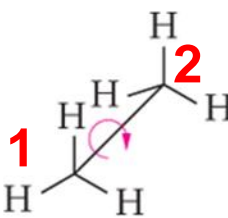
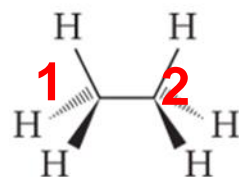
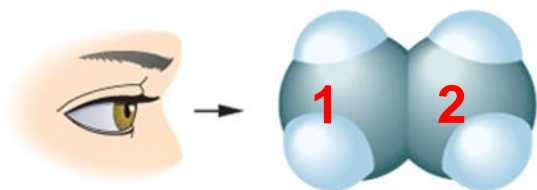
■ 紐曼投影式

Newman Projection

相錯構形，Staggered



交會構形，Eclipsed



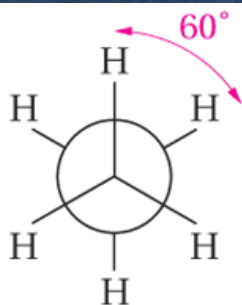
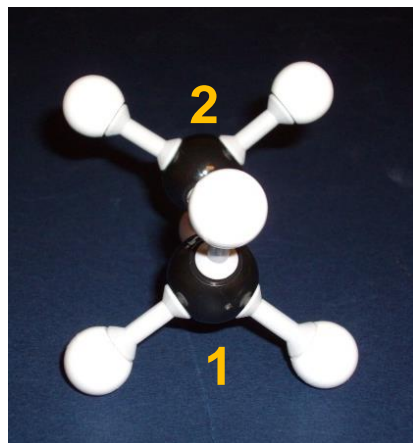


構形與紐曼投影式

■ 構形 (conformation)

- 分子因單鍵旋轉使三度空間排列改變

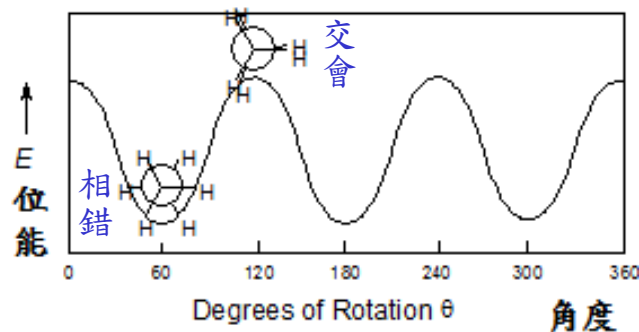
相錯構形
能量較低



紐曼投影式判斷
穩定性

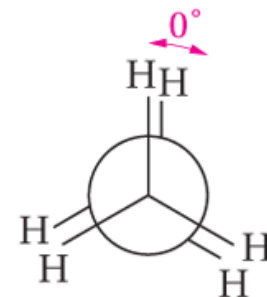
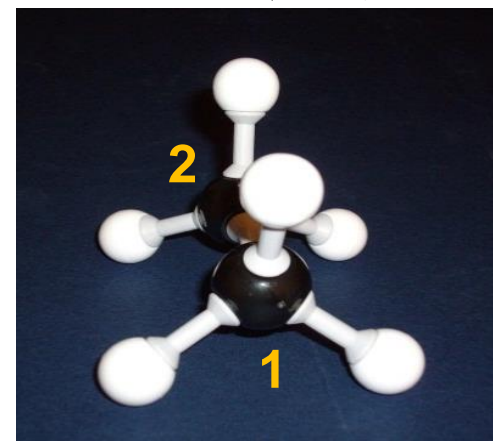


相錯構形穩定



分子構形位能圖

交會構形
能量較高

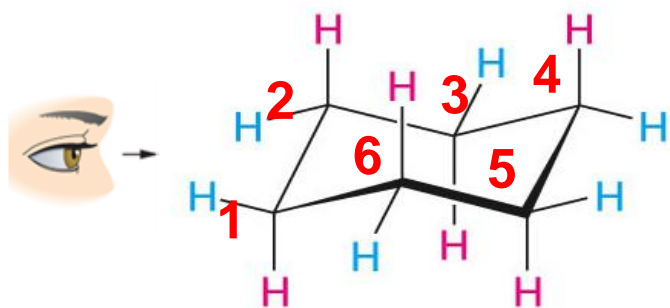




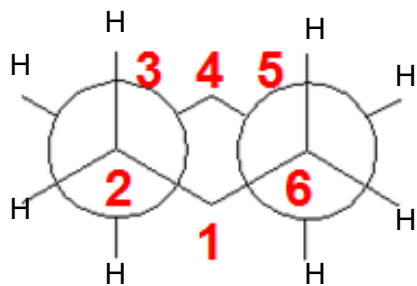
環己烷之椅型及船型構形

- 環己烷 C_6H_{12} ：椅型、船型

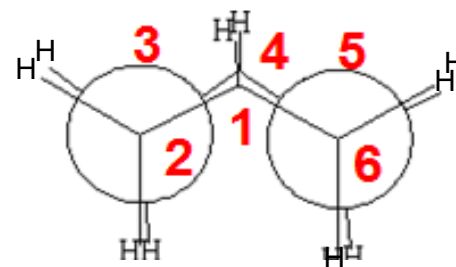
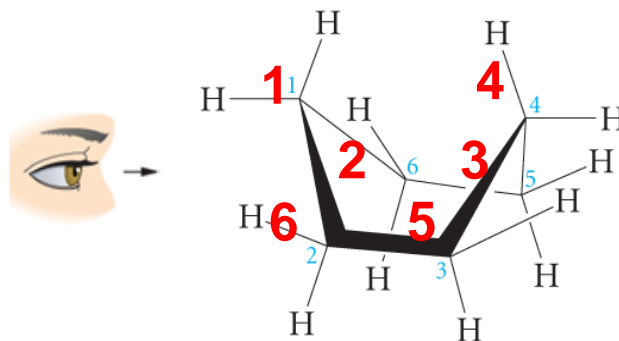
椅型構形，chair form



椅型穩定



船型構形，boat form





同分異構物

同分異構物
isomers

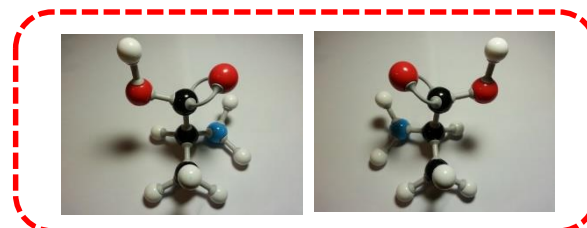
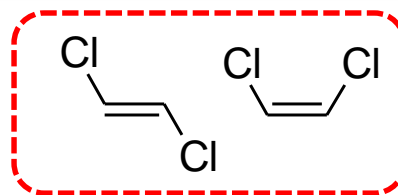
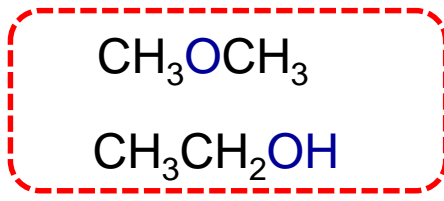
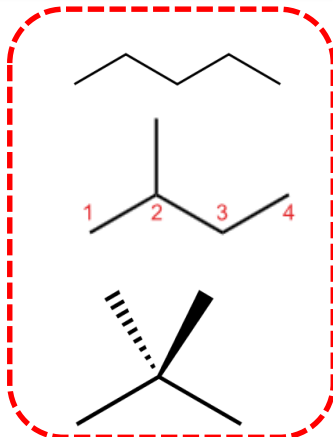
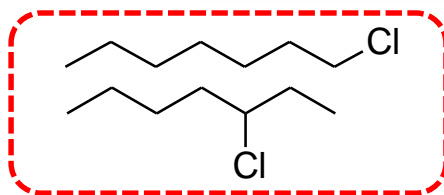
分子式相同
結構式不同

原子連接
方式不同

原子連接方式同
但空間配置不同

結構異構物
structural isomers

立體異構物
stereoisomers

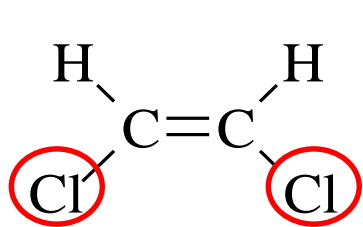




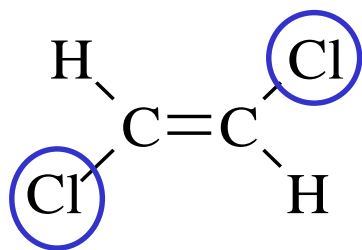
立體異構物之順反異構物

順反異構物（舊稱幾何異構物）

- C=C雙鍵不能旋轉
- 原子連接相同、具C=C或環狀，取代基空間配置不同
 - 順式 *cis*：位於雙鍵或環之同側
 - 反式 *trans*：位於雙鍵或環之異側

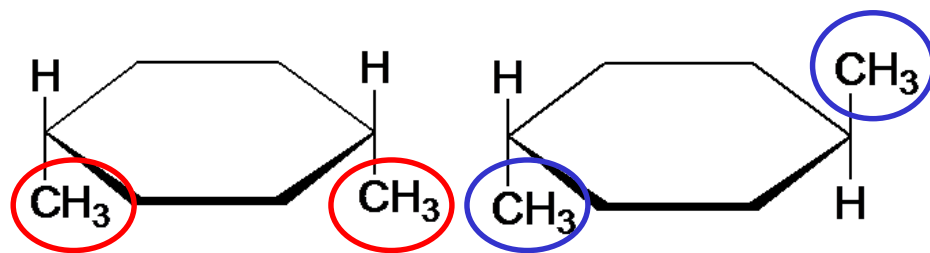


順式



反式

1,2-二氯乙烯之順反異構物



順式

反式

1,4-二甲基環己烷之順反異構物



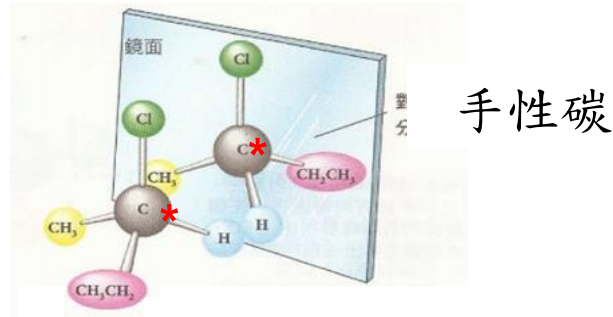
立體異構物之鏡像異構物

■ 手性碳 (chiral carbon)

- 具四個不同取代基之碳，以C*標示

■ 鏡像異構物 (光學異構物)

- 具手性碳之分子與其鏡像無法完全重合者
- 鏡像異構物可讓平面偏極光 (plane-polarized light) 旋轉，角度相同但方向不同，又稱光學異構物
- 右旋光性，dextrorotatory，使平面偏極光順時鐘旋轉，以 (+) 或 *d*- 表示
- 左旋光性，levorotatory，使平面偏極光逆時鐘旋轉，以 (-) 或 *l*- 表示
- 旋光性需以旋光計實測得





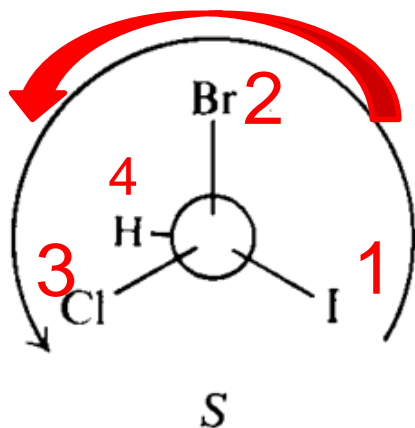
立體中心絕對組態 R, S 命名系統

優先法則 (priority rules) :

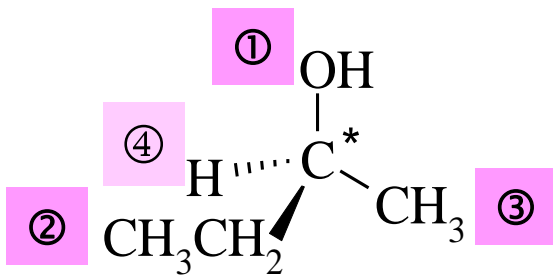
- 比較4個取代基原子之原子序，原子序大者優先序高 (標為1)

逆時針

S-



S



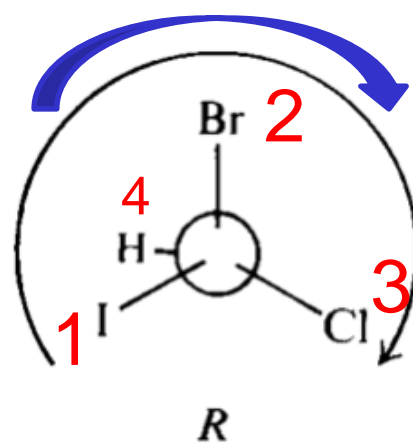
$$[\alpha]_D^{25} +13.52$$

系統命名

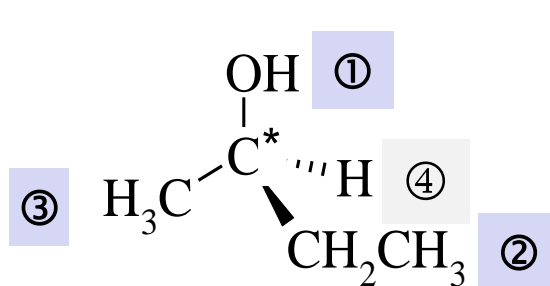
(S)-(+)-2-丁醇

順時針

R-



R



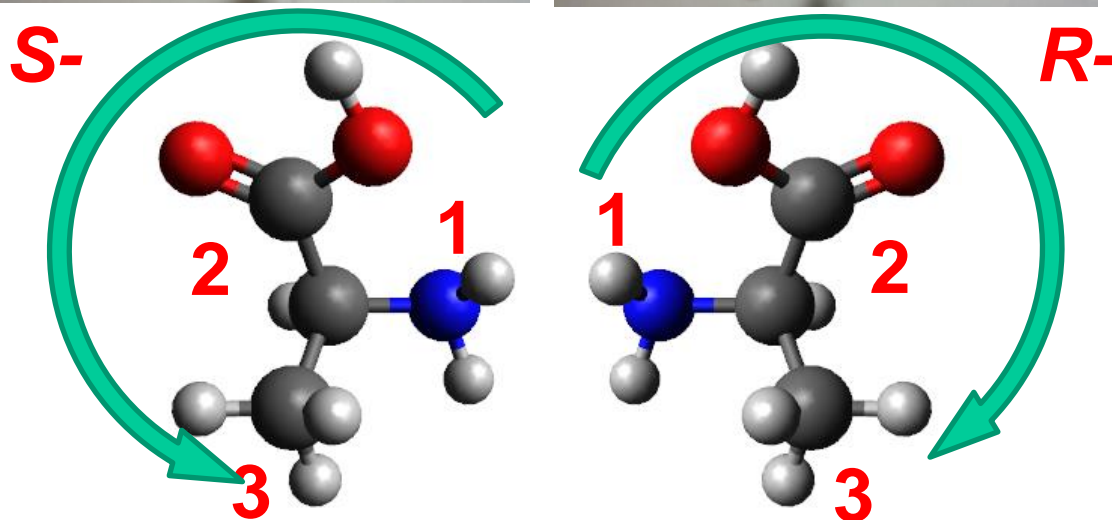
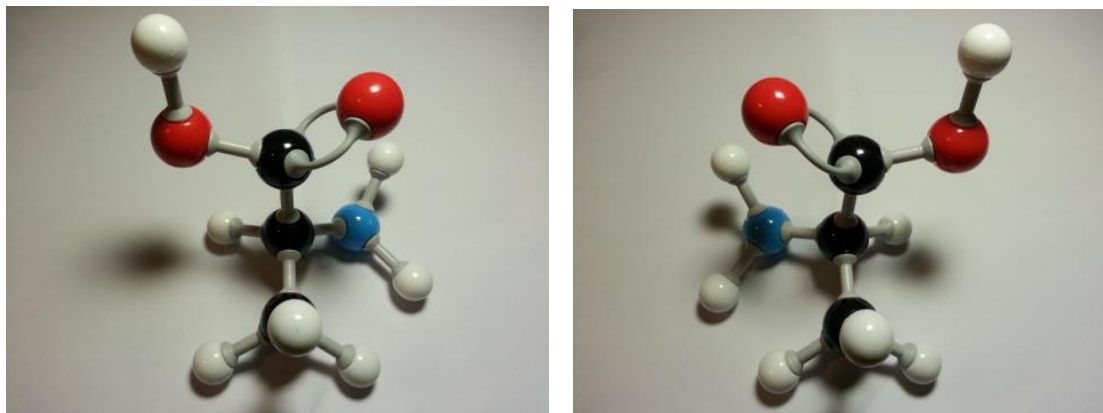
$$[\alpha]_D^{25} -13.52$$

(R)-(-)-2-丁醇



鏡像異構物觀察記錄

- 練習將兩種組態一起組裝並列比較
- 學習判斷 R -/ S -
- 分子轉到最穩定的構形再拍照





實驗注意事項

- 實驗前完成各分子結構式與系統命名
- 實驗中完成MOLYMOD分子模型組裝及拍照記錄
- 實驗結束整理MOLYMOD模型盒，交還給助教，確認清點無誤後才離開
- 借用相機需確認：
檔案複製至隨身碟，清空記憶卡




✓ 使用扳手拆卸模型，勿用蠻力造成鍵腳彎折



實驗報告

完整報告

- 實驗報告
 - 預習報告紙本
 - 結報含整理照片之電子檔
- 每個化合物需包含
 - 正確的中文系統命名
 - 英文系統命名 (IUPAC)
 - 照片 (穩定構型)
 - 表單完成後轉pdf檔
 - 上傳至NTUCOOL作業區

中文系統命名 (化學命名原則)	1-丁烯
英文系統命名 (IUPAC 命名法則)	1-butene
MOLYMOD [®] 球-棍模型	
Avogadro 模型	