

特色實驗教材九：分子模擬

鄭惟中、于淑君

國立中正大學化學暨生物化學系

2017.04.19 修訂

一、目的：

運用分子模擬軟體 **Spartan 16** 繪製普通化學實驗以及日常生活中常見的化合物，藉以瞭解化合物的分子結構及其組成原子在分子內之立體空間配置與相對能量之關係，並探討其基本性質及應用。

二、實驗技能：

學習操作分子模擬繪圖軟體，培養資料搜尋能力以及建立化學基礎知識架構。

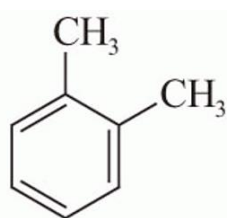
三、原理：

(一) 有機化合物：

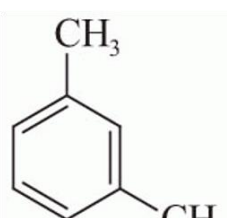
有機化合物是指含碳化合物或碳氫化合物之衍生物。由於碳具有四個價電子，可以 sp^3 、 sp^2 、 sp 各種混成軌域與其他原子形成單鍵、雙鍵、環狀等各種類型化合物。有機化合物常具有異構物 (isomers)，即分子式相同結構式不同的物質；大分為結構異構物 (structural isomers) 與立體異構物 (stereoisomers) 二類。

(二) 結構異構物：

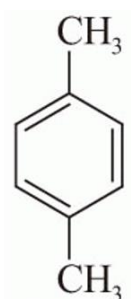
結構異構物是指分子式相同但原子連接方式不同的物質。例如圖一的鄰-、間-及對二甲苯，三者之分子式均相同，但原子連接方式不同、性質各異。



鄰二甲苯



間二甲苯



對二甲苯

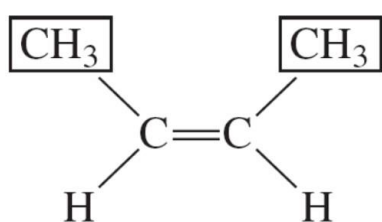
圖一、二甲苯之結構異構物

(三) 立體異構物：

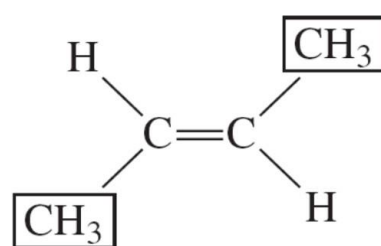
另有一類同分異構物，各原子間連接方式相同，但是原子的空間排列不同，稱為立體異構物，立體異構物又可分為構形異構物 (conformational isomers)、順反異構物 (cis-trans isomer) 及光學異構物 (optical isomers)。

1. 順反異構物：

碳氫化合物具有不飽和雙鍵者，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，會有順反異構物出現，又稱幾何異構物 (geometric isomers)，是屬於立體異構物之一種。例如圖二的 2-丁烯 (2-butene)，順式 2-丁烯分子具有極性，沸點較反式高。



順-2-丁烯 (cis-2-butene)
熔點 -139°C ；沸點 3.7°C



反-2-丁烯 (trans-2-butene)
熔點 -106°C ；沸點 0.3°C

圖二、2-丁烯之順反異構物

2. 構形異構物：

碳氫化合物經由碳原子的連結成為環形者，稱為環烴 (cyclic hydrocarbons)。若有二或多個取代基在環上，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，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)，如圖三所示。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。



船型

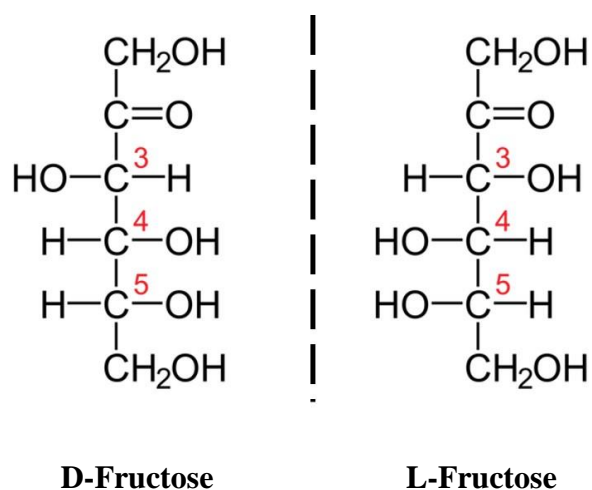


椅型

圖三、環己烷之構形異構物

(四) 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，如圖四所示。



圖四、Fructose in open-chain form (直鏈狀果糖)之鏡像異構物

四、儀器與材料：

1. 自備隨身碟。
2. **Spartan 16** 軟體下載

(<http://deptche.ccu.edu.tw/Chemistry/PChem/PChem1/Spartan16.htm>)

五、實驗步驟：

1. 聽取助教指示下載 **Spartan 16** 並聆聽軟體操作說明。
2. 參考實驗表單，瞭解本次實驗所需要之內容數據。
3. 繪製序號 **1-12** 的化合物，並參照表格寫出性質。

4. 繪製序號 **13-15** 的化合物，並比較三個構形異構物的能量差異。
5. 繪製序號 **16-17** 的化合物，並比較兩個順反異構物的能量差異。
6. 繪製序號 **18** 化合物的兩種構形，並比較兩種不同構形異構物的能量差異。
7. 繪製序號 **19-20** 的化合物，並分別畫出兩種鏡像異構物，並標示出不對稱中心的位置。
8. 實驗結束後，將圖檔存進隨身碟後，舉手請助教檢查，檢查完畢後關閉電腦，安靜離開電腦教室。
9. 將所繪製的分子結構圖檔剪貼整理至實驗結報中。

六、參考資料：

1. **大學普通化學實驗**，第十四版，國立臺灣大學化學系著。
2. 國立中正大學化學暨生物化學系胡維平教授物理化學課程網頁。
(<http://deptche.ccu.edu.tw/Chemistry/PCHEM/PCHEM1>)

六、實驗結果

序號			
圖檔 (含原子編號)			
IUPAC 命名			
中文名			
英文名(俗稱)			
分子結構敘述 (X = O, N) (請標示出原子編號)			
	鍵結型態	鍵長(Å)	鍵角(°)
sp^3 -C 數		1. C—C _____	\angle R—C—C _____
		2. C—X _____	\angle R—C—X _____
sp^2 -C 數		1. RC=CR' _____	\angle R—C=C _____ \angle R'—C=C _____
		2. C—X _____	\angle R—C=X _____
		3. R R'C=X _____	\angle R—C=X _____ \angle R'—C=X _____
化合物性質及應用			
熔點			
沸點			
常溫下狀態			
物質安全資料			
常見應用			

七、化合物名稱

序號	命名	名稱
1	中文	酞酐
	英文	phenolphthalein
	IUPAC 命名	3,3-bis(4-hydroxyphenyl)-2-benzofuran-1(3 <i>H</i>)-one
2	中文	酞酐
	英文	phthalic anhydride
	IUPAC 命名	1,2-benzenedicarboxylic anhydride
3	中文	鄰甲氧基酚
	英文	guaiacol
	IUPAC 命名	2-methoxyphenol
4	中文	4-甲基苯酚
	英文	cresols
	IUPAC 命名	4-methylphenol
5	中文	乙二胺四乙酸
	英文	ethylenediaminetetraacetic acid, EDTA
	IUPAC 命名	2,2',2'',2'''-(ethane-1,2-diyl)dinitrilo)tetraacetic acid
6	中文	大麻(四氫大麻酚)
	英文	cannabis
	IUPAC 命名	(6 <i>aR</i> ,10 <i>aR</i>)-6,6,9-trimethyl-3-pentyl-6 <i>a</i> ,7,8,10 <i>a</i> -tetrahydro-6 <i>H</i> -benzo[<i>c</i>]chromen-1-ol
7	中文	尼古丁
	英文	nicotine
	IUPAC 命名	(<i>S</i>)-3-[1-methylpyrrolidin-2-yl]pyridine
8	中文	海洛因(二乙醯嗎啡)
	英文	diacetylmorphine
	IUPAC 命名	(4 <i>R</i> ,4 <i>aR</i> ,7 <i>S</i> ,7 <i>aR</i> ,12 <i>bS</i>)-2,3,4,4 <i>a</i> ,7,7 <i>a</i> -hexahydro-1 <i>H</i> -4,12-methanonaphtho[1,8 <i>a-b</i>]benzofuran-7,9-diyl diacetate
9	中文	三聚氰胺
	英文	melamine
	IUPAC 命名	1,3,5-triazine-2,4,6-triamine
10	中文	咖啡因
	英文	caffeine
	IUPAC 命名	1,3,7-trimethylpurine-2,6-dione

11	中文	矽靈 (只需畫出三聚物, n = 3)
	英文	dimethicone $(\text{CH}_3)_3\text{SiO}-[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_n-\text{Si}(\text{CH}_3)_3$
	IUPAC 命名	poly(dimethylsiloxane)
12	中文	對羥基苯甲酸(防腐劑)
	英文	4-hydroxybenzoate
	IUPAC 命名	4-hydroxybenzoic acid
13	中文	鄰苯二酚
	英文	catechol
	IUPAC 命名	pyrocatechol
14	中文	間苯二酚
	英文	resorcinol
	IUPAC 命名	benzene-1,3-diol
15	中文	對苯二酚
	英文	hydroquinone
	IUPAC 命名	hydroquinone
16	中文	順丁烯二酸酐
	英文	maleic anhydride
	IUPAC 命名	furan-2,5-dione
17	中文	反丁烯二酸酐
	英文	fumaric acid
	IUPAC 命名	(2E)-but-2-enedioic acid
18	中文	環己烷
	英文	cyclohexane
	IUPAC 命名	cyclohexane
19	中文	樟腦
	英文	camphor
	IUPAC 命名	1,7,7-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-one
20	中文	葡萄糖 (請畫出環狀結構)
	英文	glucose (cyclic form)
	IUPAC 命名	(2R,3S,4R,5R)-2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanal

Copyright © 2017 All rights reserved.

國立中正大學化學暨生物化學系