

•科普•

doi: 10.3866/PKU.DXHX201804026

www.dxhx.pku.edu.cn

用一种新式的串珠分子模型来介绍分子的点群

赵浩, 高珍, 李维红, 贾莉, 马艳子, 边磊, 黄军, 关玲, 徐烜峰, 马锴果*

北京大学化学与分子工程学院, 化学国家级实验教学示范中心, 北京 100871

摘要: 利用生活中常见的串珠编制分子模型, 得到了一系列属于不同点群的 C_{84} 同分异构体的串珠分子模型。这些模型可作为可视化教具, 帮助学生理解抽象的分子点群的相关知识, 也可以作为科普产品向大家介绍与对称性相关的知识。

关键词: 串珠分子模型; C_{84} ; 同分异构体; 分子点群

中图分类号: G64; O6-1

A New Beaded Molecular Model Used to Introduce the Point Group of Molecules

ZHAO Hao, GAO Zhen, LI Weihong, JIA Li, MA Yanzi, BIAN Lei, HUANG Jun, GUAN Ling, XU Xuanfeng, MA Kaiguo *

National Demonstration Center for Experimental Chemistry Education, College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Abstract: Inspired by beading in daily life, a series of C_{84} isomers molecular models belonging to different groups were obtained. These models can be used as visual aids to help students understand the relevant knowledge of abstract molecular point groups, and also can be used to introduce symmetry-related knowledge to the public.

Key Words: Beaded molecular model; C_{84} ; Isomer; Molecular point group

群论作为一个数学分支应用于化学学科, 在解决化学体系对称性方面的问题有着重要的意义, 化学专业本科生在结构化学课程中学习分子和晶体的结构性质时就涉及到对称性的知识。化学体系中的对称性一般用旋转轴、镜面和对称中心等对称元素来描述, 每个分子都具有一组特定的、自洽的对称元素系, 由它产生的全部对称操作形成一个点群^[1-3]。对称元素、对称操作和点群是利用对称性解决化学中对称相关问题的基础, 熟练地掌握这些基础概念可以为今后学习晶体结构对称性及描述配位键打下坚实的基础。

在对称性相关知识的学习过程中, 由于这部分内容过于抽象, 学生难以将各种对称操作在脑海中形成对应的三维立体图, 无法产生感性的认识, 往往导致学生对这部分内容只能有表面的理解, 无法形成深刻的印象, 更不能达到灵活应用的目的。实践证明, 利用分子模型进行可视化辅助教学, 借助具体的分子模型将抽象的概念具体化, 可以大幅度地提高学生的学习动力, 改善学习效果^[4]。目前已有大量文献报道, 在给学生介绍对称性知识的时候, 大家会使用各种模型进行辅助教学, 例如美国阿拉巴马大学将利用 3D 打印技术得到的立体分子模型用于分子对称性和点群的教学, 结果证明 3D 打印技术制作分子模型的方法快捷而且适用面广, 并且在教学中取得了很好的教学效果^[5]。

收稿: 2018-04-19; 录用: 2018-04-23; 网络发表: 2018-05-02

*通讯作者, Email: makg@pku.edu.cn

基金资助: 2016 年北京市科学技术普及专项项目

巴西弗鲁米嫩塞联邦大学挑选日常生活中用到的具有对称性或者手性特点的物品, 让学生通过实物游戏做题的形式学习物品的对称性等相关知识^[6], 通过实物与游戏结合提高了学生的学习兴趣。波兰的奥波莱大学利用电烙铁、电钻和螺钉等工具将废弃的塑料瓶盖连接起来制作成分子模型^[7]; 在满足教学需要的同时, 还实现了废弃物的重新利用。但是该方法制得的模型体积偏大, 而且制作费时。中国台湾大学的金必耀教授^[8]使用串珠模型编制了大量分子结构, 实现了科学与艺术相结合, 展现了化学结构的魅力。本文用串珠模型制作了一系列具有不同对称性的 C_{84} 同分异构体, 通过这种新式的分子模型, 向学生介绍点群及对称性的相关知识。

1 串珠模型与富勒烯分子

串珠分子模型作为一种新式的分子模型形式, 十分便于编制和展示富勒烯家族成员的结构。富勒烯是由碳原子以五元环与六元环形式组合而成的分子, 随着六元环数量的变化, 富勒烯家族有着众多结构不同的成员。很多富勒烯分子具有高度对称性, 如其中最早发现的 C_{60} 是由 12 个五元环和 20 个六元环构成的球状结构, 具有 I_h 对称性, 有 120 个对称操作^[1]。 C_{84} 也是富勒烯家族中的一员, 由于碳的五元环和六元环的不同排列使得 C_{84} 有 24 种同分异构体^[9], 这些分子具有不同的空间结构, 我们发现这些同分异构体分属于多种不同的分子点群, 如果有一系列的 C_{84} 分子模型, 就可以作为较理想的教具, 更直观地向学生介绍对应的点群知识, 所以我们参考金必耀教授^[10]制作串珠模型的方法, 编制了分属于不同点群的 C_{84} 同分异构体的串珠分子模型, 利用串珠模型进行可视化辅助教学, 在本科生学习点群及对称性操作知识时调动学生的学习积极性, 提高学习效率。这 24 种 C_{84} 的串珠模型同时也可以作为科普展示作品, 让社会大众认识到化学分子的丰富多彩。

2 串珠模型编制方法简介

编制串珠模型使用的原料主要包括网购的串珠和无弹力水晶线, 原料简单易得, 有兴趣的学生完全有能力自行编制。其编制原理是使用无弹力水晶线将手工串珠串接, 由于富勒烯分子主要由五元环和六元环组成, 所以只需用水晶线将串珠以五元环和六元环的形式按照富勒烯分子的结构串联起来即可得到一个富勒烯串珠分子模型^[10]。这里需要指出的是, 串珠分子模型与其他常见的球棍分子模型不同的地方在于, 常规的分子模型一般用球代表原子, 用棍代表分子键, 而串珠编制的分子模型中串珠代表的是分子键, 串珠之间的节点则代表原子。图 1 为我们编制的 C_{60} 串珠分子模型示意图。

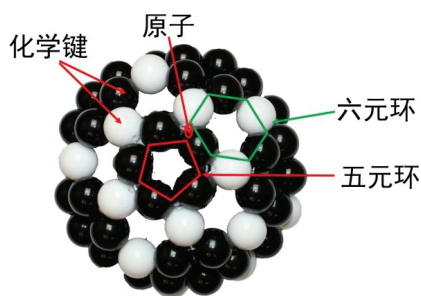


图 1 C_{60} 的串珠分子模型

3 用串珠模型展示分子点群

按照本文第 2 小节中介绍的方法, 我们编制了一系列的 C_{84} 分子模型, 并且将五元环用不同颜色的串珠加以区分, 最后得到了一系列的 C_{84} 同分异构体的串珠分子模型, 这些分子属于不同的分

子点群, 具体包括: C_1 、 C_s 、 C_n 、 C_{nv} 、 D_n 、 D_{nh} 、 D_{nd} 、 T_d 。

我们按照对称操作是否含有旋转轴将分子点群的分类, 可分为无轴群、单轴群、双面群、立方体群, 下面结合部分分子模型分别进行说明。

3.1 无轴群

无轴群是指没有对称轴的分子点群, 这类分子点群主要包括 C_1 、 C_i 和 C_s 点群。 C_{84} 的同分异构体中有符合 C_1 点群和 C_s 点群对称性的分子, 所做的串珠分子模型如图 2、图 3 所示, 其中属于 C_s 点群的分子具有 1 个镜面。



图 2 $C_{84}(C_1)$

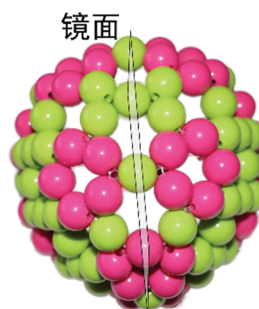


图 3 $C_{84}(C_s)$

3.2 单轴群

单轴群是指包含一个主旋转轴 C_n , 但是没有其他垂直于 C_n 轴的 C_2 轴的点群。这一类点群主要包括 C_n 、 C_{nv} 和 C_{nh} 点群。本文以具有 C_2 和 C_{2v} 点群对称性的 C_{84} 分子为例, 给大家介绍具有 1 个主旋转轴的单轴群。图 4 分子模型属于 C_2 点群, 对称元素只有 1 个 C_2 旋转轴。图 5 的分子模型属于 C_{2v} 点群, 具有 1 个 C_2 旋转轴和 2 个镜面。

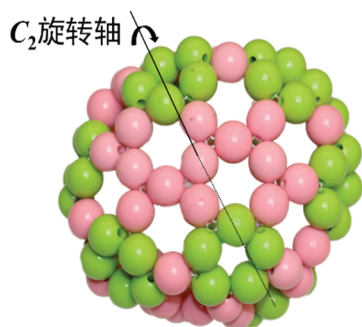


图 4 $C_{84}(C_2)$

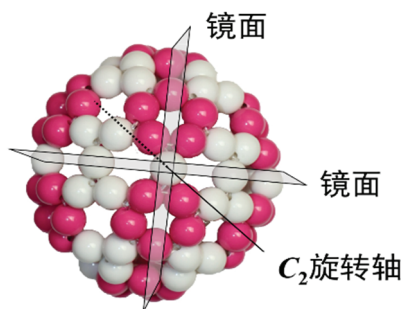
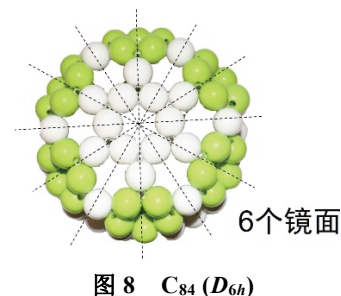
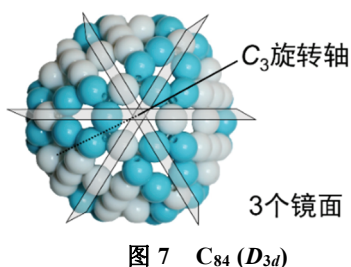
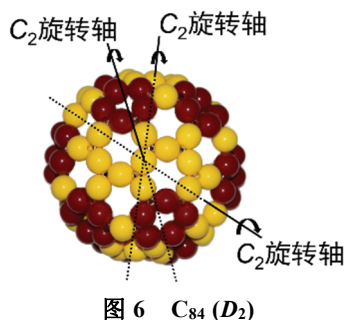


图 5 $C_{84}(C_{2v})$

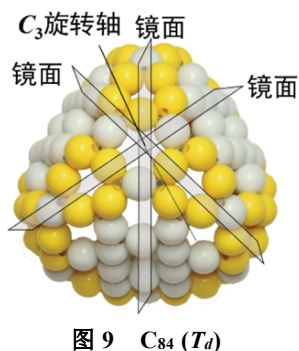
3.3 双面群

双面群是指除了包含 1 个主旋转轴以外, 还有垂直于主旋转轴的 C_2 轴的分子点群, 这类分子点群包括 D_n 、 D_{nh} 、 D_{nd} 点群。 C_{84} 分子的同分异构体中有较多符合该点群对称性的分子, 我们从中分别选取了具有 D_2 、 D_{2d} 和 D_{6h} 点群对称性的分子向大家简单介绍双面群。图 6 所示分子模型为属于 D_2 点群的 C_{84} 分子, 该分子模型包含的对称元素包括 3 个 C_2 旋转轴。图 7 为属于 D_{3d} 点群的 C_{84} 分子模型, 该点群的分子具有 1 个 C_3 旋转轴、3 个垂直于 C_3 旋转轴的 C_2 旋转轴和 3 个镜面, 其 C_3 旋转轴和镜面如图 7 所示。图 8 为属于 D_{6h} 点群的 C_{84} 分子模型, 该点群具有较多的对称元素, 包括 1 个 C_6 旋转轴、6 个垂直于 C_6 轴的 C_2 轴、1 个垂直于 C_6 轴的镜面、1 个对称中心, 图 8 中虚线所示为上述对称元素所衍生出来的与 C_6 旋转轴共轴且含有 C_2 轴的镜面。



3.4 立方体群

立方体群是指具有两个以上高于二重轴的旋转轴，这类分子点群的特点是具有高度对称性，包括 T_d (正四面体)， O_h (立方体、正八面体)， I_h (正十二面体、正二十面体)。图 9 所示的是属于 T_d 点群的 C_{84} 分子模型，分子为正四面体结构，从图中角度可以看到 3 个镜面，3 个镜面相交处为 C_3 旋转轴。



4 结语

本文利用串珠分子模型易于编制球状结构的特点，编制了一系列具有不同对称性的 C_{84} 同分异构体分子模型。通过串珠分子模型展示分子点群，直观形象，具有一定艺术展示性。在教学过程中让学生通过寻找串珠分子模型中的对称元素来判断分子的点群，从而让学生对点群的概念更加具象化。

串珠分子模型不仅可以辅助教学，还可以用于科普展示。目前我们所编制的 C_{84} 分子模型在北京大学化学与分子工程学院 D 区大厅及北京大学化学实验示教中心都有展示，可针对不同层次的参观人士介绍相应内容。对于没有物质结构知识的人士，可以让他们直观地“看”到化学分子的美和多样性；对于学习过一定化学知识的人士，可以介绍与富勒烯相关的碳材料；对于化学类专业的大学生，可以让他们通过仔细观察模型了解分子的对称性和点群。大量参观者反馈这种分子模型具有极佳的视觉效果，在众多展品中很有吸引力，大家乐于把玩它们，学过结构化学的学生会下意识地寻找其中的对称元素。同时编制模型的材料来源于日常生活，也使得这类模型非常便于普及和使用。

参 考 文 献

- [1] 麦松威, 周公度, 李伟基. 高等无机结构化学. 第 2 版. 北京: 北京大学出版社, 2006: 127–135.
- [2] 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第 4 版. 北京: 北京大学出版社, 2010: 118–133.
- [3] 高松, 陈志达, 黎乐民. 分子对称性群. 北京: 北京大学出版社, 1996: 35–69.

-
- [4] 麦裕华. 化学教育, **2011**, No. 6, 77.
- [5] Scalfani, V. F.; Vaid, T. P. *J. Chem. Educ.* **2014**, *91*, 1174.
- [6] Silva, D. D. M.; Ribeiro, C. M. R. *J. Chem. Educ.* **2017**, *94*, 1272.
- [7] Dawid, S. *J. Chem. Educ.* **2017**, *94*, 256.
- [8] 金必耀, 左家静. 高等和职业教育中的化学教育//中国化学会第 30 届学术年会摘要集第十二分会. 大连, 2016 年 7 月 1-4 日.
- [9] Fowler, P. W.; Manolopoulos, D. E. *An Atlas of Fullerenes*; Dover Publications, Inc. Mineola: New York, USA, 2006; pp 258-259.
- [10] 金必耀, 左家静. 科学月刊, **2012**, *42* (3), 230.