

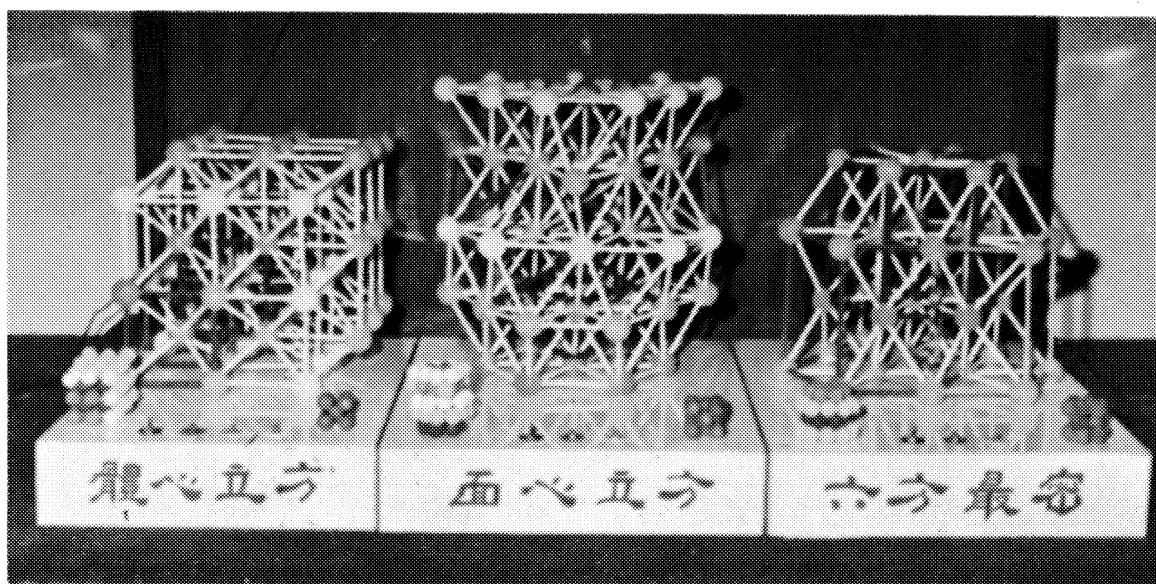
金屬晶體堆集模型的記計與製作

高中組化學第三名

省立新竹女子高級中學

作者：李王凡等四名

指導老師：王珍珠



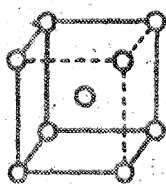
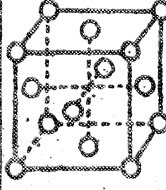
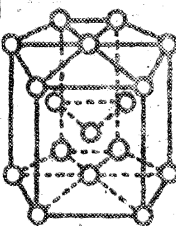
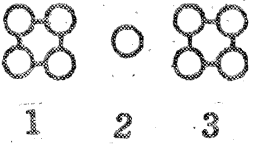
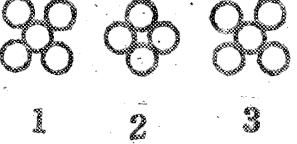
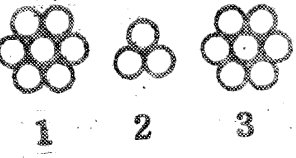
一、動機：

化學實驗課中，我們用通草球和牙籤所做的晶體堆集模型，因為容易鬆動而無法擴大，只是一兩個單位晶體拼湊，觀念仍然模糊不清，尤其是六方最密和面心立方的堆集更難由通草球和牙籤的模型中分辨清楚，即使有辦法利用萬能糊把晶體結構擴大，由於結構的複雜，仍然令人眼花撩亂，對於老師所提到諸如單位晶體的位置，每種晶體間各層次的差異，晶體中原子的配位數以及單位晶體內的原子數等問題，甚難獲得具體的概念，因而減低了我們學習的興趣，於是我們建議老師能否將通草球著上顏色以便分

層次，進而想到何不利用內裝灯泡的半透明塑膠球，不同顏色代表不同層次，固定在硬塑膠管的架構上，再配上燈光閃動的效果，來辨認晶體的結構呢？如此不但能提高學生的學習興趣，而且能使晶體結構一目了然，解決一般學生對晶體堆集的模糊觀念，所以利用寒假時間，我們便在老師的指導下著手製作。

二、前言：

如 如圖在一平面上以中心黑色球而言，能夠靠進它而具有相同半徑的球數，頂多只有周圍 6 個，上、下各 3 個，換句話說，該球的最多可能配位數（即最鄰近的球數）是 12，因此一種堆集，若各球的配位數為 12，則該堆集方式必為最密堆集，屬於最密堆集者僅有六方最密與面心立方兩種方式，另外金屬尚有一種堆集，各原子的配位數只有 8 個，此種堆集不屬於最密堆集，稱為體心立方堆集，這些堆集都是由各種不同的單位晶體連續拼湊完成，分別敘述如下：

	體 心 立 方	面 心 立 方	六 方 最 密
單位晶體	 說明：立方體的 中心有一原 子	 說明：立 方體各面 的中心均 有一原子	 說明：單 位晶體是 六方柱形
單位晶體 中各層平 面	 1 2 3	 1 2 3	 1 2 3

單位晶體內的原子數	$1 + \frac{1}{8} \times 8 = 2$ 說明：立方體中央有一原子，立方體的八個角每原子僅有 $\frac{1}{8}$ 的部份在晶格內	$\frac{1}{8} \times 8 + \frac{1}{2} \times 6 = 4$ 說明：立方體的八個角每原子僅有 $\frac{1}{8}$ 的部分在晶格內，六個面心原子各僅有 $\frac{1}{2}$ 的部分在晶格內	$\frac{1}{6} \times 12 + \frac{1}{2} \times 2 + 3 = 6$ 說明：六角環上（中心原子除外）的 12 原子各只有 $\frac{1}{6}$ 的部分在晶格內，2 個環上中心原子各有 $\frac{1}{2}$ 的部分在晶格內，六方柱體內又有 3 個原子
各原子的配位數	8	12	12
原子佔有晶體之空間	$\frac{2}{3}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$
	說明：詳見討論部份		

三、材料與工具

1. 材料

白色中空塑膠旗桿	(外徑 0.7 cm, 長 54 cm)	130 支
玩具塑膠乒乓球	(粉紅、綠、黃、白四色)	20 打
壓克力板	(紅、黃、藍、白色各 40 cm ²)	每種顏色 1 塊
奇異墨水筆	(紅、黃、藍三色)	每色各一支
通草球	(白色直徑 2 厘米)	150 個
保麗絨球	(藍色直徑 2 厘米)	50 個
顏料	(紅、黃、綠三色)	各一罐
三夾板	(3 分厚, 32 厘米見方)	一塊

奇美素色板	(3尺×6尺)	1塊
小灯泡	(12V 0.1A)	95個
變壓器	(9V/3A)	3個
保險絲	(0.5A)	3個
ON/OFF 開關	(1.5A)	3個
暫接開關	(1.5A)	7個
三角木條	(6尺)	4支
帶插頭電源線	(9尺)	3條
萬能糊		2罐
強力膠		1罐
焊錫		3尺
細電線		20尺
牙籤		1盒
2 工具		
米尺	45 cm	1支
烙鐵	30 W	1支
蓄電池	6 V	1個
電鑽		1把
尖口鉗		1支
斜口鉗		1支
大、小鋸子		各1支

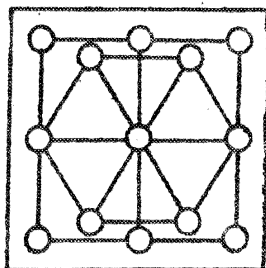
四、製作過程

1 準備工作

- (1)先用小通草球(白色)和牙籤粗略製作模型(參考照片)，以供正式架構晶格時的藍本。
- (2)用塑膠乒乓球 7 個在布上排成六方形如圖 以決定
各球中心間之距離(本模型採用 12 cm)
- (3)在三夾板上作出精確的正六邊形與正方形，做為製作晶格時的模子，並在原子應有的位置上鑽一圓孔，以便放置塑膠球

(見圖(1))。

(圖(1))



(4)參照粗製通草球晶體模型，計算各種晶格中，塑膠管需要的大約長度及數量，依照所需以小鋸子裁製。

晶體	數量 (支)	長度			
		8 cm	10 cm	15 cm	16.5 cm
體心		125	108	—	—
面心		—	211	36	—
六方		—	133	—	16

(5)參照粗製通草球晶體模型，計劃特定晶格（以燈光閃示者）的位置，以便選取適當的球色、球數，並決定球的相對位置。

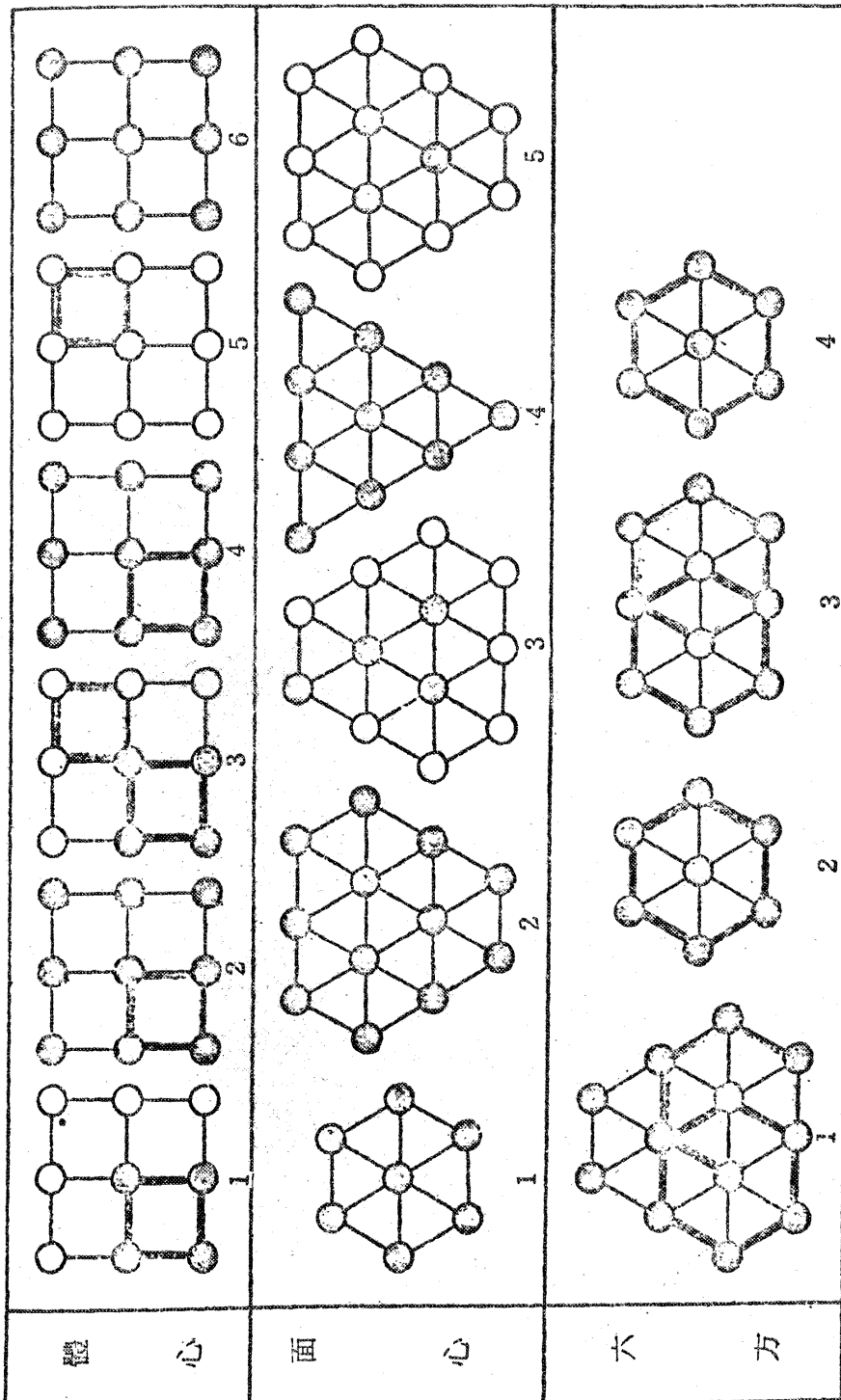
(6)旗桿依下表用奇異墨水著色以便區分單位晶體所在。

長度	數量 (支)	顏色			
		藍	紅	黃	紅黃相間
10 cm		24	24	24	0
15 cm		12	12	12	0
16.5 cm		6	4	4	2

(7)用蓄電池檢驗以除去亮度不合理想的灯泡。

2. 製作方法：

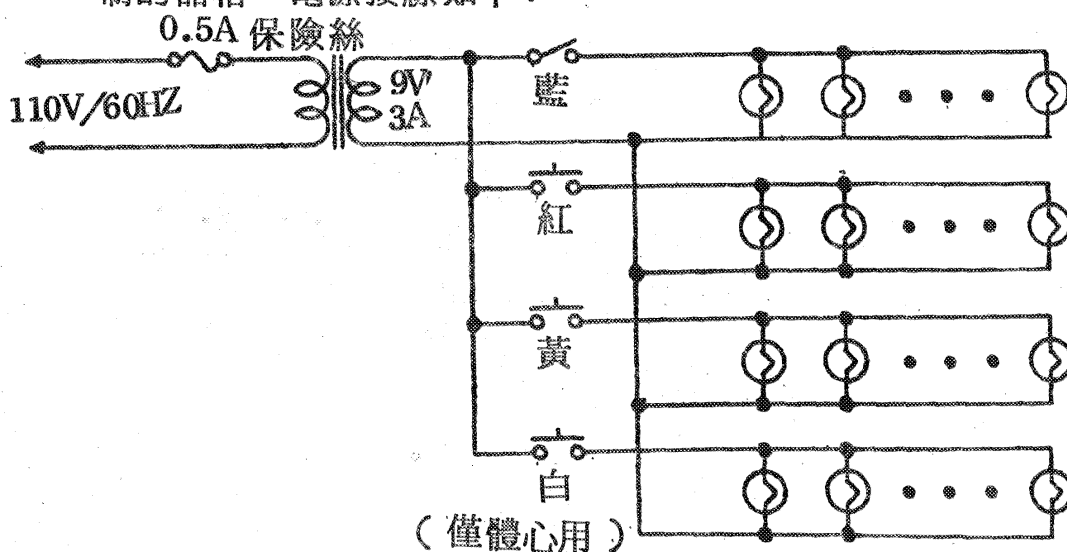
- (1) 依照預先構想的特定晶格位置，選擇各層次所需的色球，在適當部位打點鑽洞，以便插入塑膠管。
- (2) 在自製三夾板的模子上，以適當長度的塑膠管銜接各球，同法製作各層次的結構，如下：



- (3)在特定晶格的外層各球中裝入小灯泡，以並聯方式焊接各導線，一面參照通草球粗模，將各層次架構起來，一面使導線在用以組合的中空塑膠管中通過，最後經由最下層塑膠球引出。
- (4)將三個特定晶格各稜邊分別框以藍、紅、黃三種顏色（共用者以相間方式表達），以期更能一目了然其相關性。
- (5)在單位晶體中，把各原子在晶格內的部分著上藍色。
- (6)將所有代表鍵的塑膠管插入各球的正確部位，最後檢視並修正模型中各球的相對位置至最正確程度，然後以萬能糊固定之。
- (7)將奇美素色板裁製以下規格用強力膠和三角木條製作三個無底木箱。

cm^2	10 × 40	10 × 45	10 × 60	60 × 45	60 × 40
塊數	2	4	6	2	1

- (8)依模型底層各球的位置在箱面上打洞，並使灯泡導線經由底層塑膠球底部的小段塑膠管引入箱內，再利用強力膠，將模型固定在木箱上。
- (9)將各組電線接上開關及電源，並以對應色圈標示各開關所控制的晶格。電源接線如下：

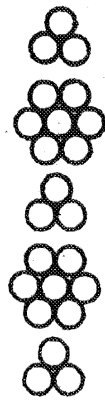


(10) 依完成之模型用彩色通草球，將各原子真正空間關係緊密排列以供比較，則更能顯出本模型之價值。

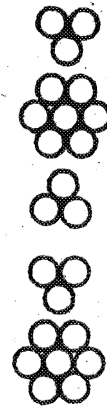
五、討論：

1 理論部分

(1) 從模型中我們可以很清楚的看出六方最密與面心立方堆集的差異在於前者的六角環，每隔一層即能上下呼應而後者的六角環每隔兩層，才能上下對應，且中間兩層的三角形互成 60° 角。

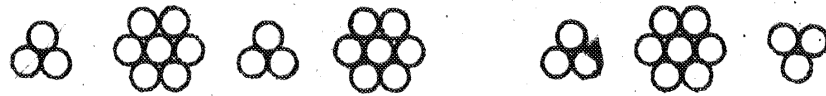


六方最密



面心立方

(2) 從另一觀點看，六方最密堆集與面心立方堆集的差異乃在於第一層與第三層的不同，前者兩三角形上下對應，而後者兩三角互成 60° 角。



1

2

3

4

1

2

3

六方最密

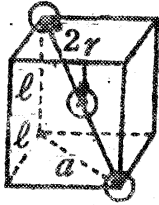
面心立方

(3) 六方最密堆集各原子之配位數在實驗課中很容易觀測出來，但面心立方堆集各原子之配位數不易由單位晶體中觀察，必須與六方最密堆集作比較才能推測出來。

(4) 在模型中，我們很清楚地得到了各晶格的立體形像，再配合各晶格內的原子數，便能計算出原子在晶格內佔有的空間比

例關係。(r = 原子半徑 ; l = 立方體邊長 ; h = 六方柱體之高)

a. 體心立方



$$a^2 = l^2 + l^2$$

$$(4r)^2 = l^2 + a^2$$

$$\therefore (4r)^2 = l^2 + 2l^2$$

$$\therefore r = \frac{\sqrt{3}}{4} l$$

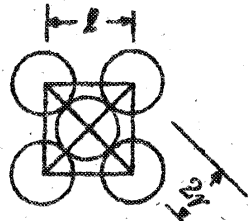
⇒ 原子佔有晶格之空間

$$\frac{\frac{4}{3} \pi r^3 \times 2}{l^3}$$

$$= \frac{\frac{4}{3} \times 3.14 \times \left(\frac{\sqrt{3}}{4} l\right)^3 \times 2}{l^3} = 0.74 \div \frac{3}{4}$$

$$= 0.68 \div \frac{2}{3}$$

b. 面心立方



$$(2r)^2 + (2r)^2 = l^2$$

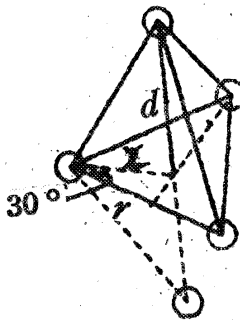
$$\therefore r = \frac{\sqrt{2}}{4} l$$

⇒ 原子佔有晶格空間

$$\frac{\frac{4}{3} \pi r^3 \times 4}{l^3}$$

$$= \frac{\frac{4}{3} \times 3.14 \times \left(\frac{\sqrt{2}}{4} l\right)^3 \times 4}{l^3}$$

c. 六方最密



$$r = x \cos 30^\circ, x = \frac{r}{\cos 30^\circ} = \frac{2r}{\sqrt{3}}$$

$$d^2 = (2r)^2 - x^2 = 4r^2 - \frac{4r^2}{3} = \frac{8r^2}{3}$$

$$d = \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{3}} r \quad h = 2d = \frac{2\sqrt{8}}{\sqrt{3}} r = \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}} r$$

$$\text{六方柱底面積}(A) = \frac{1}{2} \times (2r) \times (2r \cos 30^\circ) \times 6$$

$$= 6\sqrt{3}r^2$$



$$\text{六方柱體積} = A \times h = 6\sqrt{3}r^2 \times \frac{4\sqrt{2}}{\sqrt{3}}r$$

$$= 24\sqrt{2}r^3$$

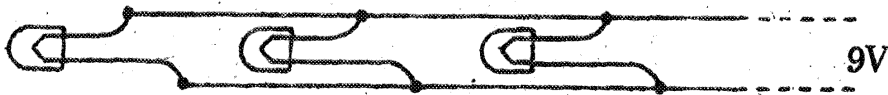
⇒ 原子佔有晶格之空間

$$\frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 6}{24\sqrt{2}r^3} = \frac{\frac{4}{3} \times 3.14 \times r^3 \times 6}{24\sqrt{2}r^3}$$

註：○內之數值表單位晶體中之原子數

2 製作部分

- (1) 我們在準備工作中製作的三夾板模子，既可使塑膠球的位置正確，又可保證同一層次的各球必在一平面上，一舉兩得。
- (2) 在球上打洞時，爲了避免角度的偏差，寧願在架構晶體的過程中，視需要才一一鑽洞，如此雖較麻煩，但能夠作到更精確的程度，然而因爲我們所使用的是玩具球，雖力求精確，而誤差仍在所難免，有關此點，我們想如果能開模型製造塑膠球，預先將各種可能使用到角度標出，如此當可改善此問題，並可將其推廣到化學中分子模型上。
- (3) 焊接灯泡導線時，爲了避免短路的情形，我們使同一灯泡的兩條電線在相距一公分的地方分別接上另一灯泡的兩條電線如圖。



- (4) 本模型在設計上有一小缺點，即灯泡損壞時，不易更換，爲了減低灯泡損壞的可能性，目前我們採用的辦法是使用 12 伏的灯泡而以 9 伏的電源供電，如此雖灯泡亮度稍減，但可延長灯泡的壽命。然而最理想的解決方法，是使模型方便更

換灯泡，關於此點的改進，我們正在研究中。

(5)本模型的設計極為簡單，只要肯花時間，人人可做。

(6)由於場所限制否則晶體再擴大，效果更佳。

六、結論：

本模型對於先前所提到的問題均能提供完滿的解決。

1. 我們利用藍、紅、黃三種色框，很清楚地指出單位晶體的位置，更以燈光顯示構成晶體的各原子。
2. 由於我們把原來緊密堆集的原子拉開，在模型中便很容易數出各原子的配位數了，同時各種晶體層次間的差異也能一目了然。
3. 從模型中色球的藍色部份，我們終於了解每一原子在晶格內的部份，為什麼有 $\frac{1}{2}$ ， $\frac{1}{6}$ ， $\frac{1}{8}$ 的差別，進而有助於計算原子佔有晶體的空間大小。

本模型在製作上雖然要花一點時間，但其價值卻很大，不但能在教學上提供老師指導學生正確具體的觀念，且外型美觀大方，生動有趣，經濟實惠，頗收一勞永逸之功，所以我們都很高興參加了這麼有意義的活動。

七、後記：

對於前項討論中所提到本模型灯泡不易更換的缺點，我們業以想到根本的解決辦法，即將模型中該點灯的部分利用單一空心旗桿貫穿至木箱內（必要時稍加溫度彎曲之）再將灯泡之位置試出並焊接於直徑0.4 mm的漆包線上直接由箱底空心管的出口塞入管中即可，如此若有灯泡損壞，只要自木箱底部將漆包線抽出，便很容易換裝灯泡了。

由於此項缺點已經改善，我們認為很值得將本模型推廣到各種晶體模型的製作而成爲一套完整的晶體堆集教具。

評語：能使用小燈泡放在圓球中表示原子位置，而易抽換，製作及說明很詳細而可行，對實驗教學有幫助，如能推廣到其他晶體結構更好。