

中華民國第四十八屆中小學科學展覽會  
作品說明書

---

高中組 化學科

040208

智慧型倉庫管理員－晶格堆積新解

學校名稱：國立中興高級中學

作者：  高二 莊濼存  高二 李承峰  高二 李佳霖  高二 姚怡紋	指導老師：  楊勝凱
---	------------------

關鍵詞：陰陽離子半徑比、空間使用率、離子晶格

## 摘要

在高中化學課程中提到的離子晶體，主要有「平面三角形」、「四面體」、「八面體」、「立方體」等四種；而離子晶格到底是如何堆積，國內目前所有的高中課程內容都是利用陰陽離子的半徑比與配位數的觀念來解釋。本組採用另一種思維—「空間使用率」的概念，以此概念來解釋同樣的情況，發現這樣的解釋與「配位數」說明之後所得之結果是完全相同的。

經過理論的推算與實驗的驗證，本組成功地發現在大自然界中，離子晶格堆積會遵循「最大的空間使用率」來進行堆積。簡單地說，大自然在晶格堆積中所扮演著是一位相當有智慧的倉庫管理員。

## 壹、研究動機

一般在坊間的化學教科書[1]中，只要提到離子晶格堆積的規則，通常是以「配位數愈多愈好」的概念來解釋，但是真的是配位數愈多愈好嗎？在偶然間，看到學校圖書館內有天下文化出版的一書「克卜勒的猜想」，書中一開始提到了一個問題，「在英國海軍倉庫的中，砲彈要如何堆放，才能有最佳的效率（即堆放最多的砲彈）？」這個問題困擾著當時的數學家，至今此問題已獲得解答了！

因此，從這本書中的問題思考，本組產生了一個新的想法，離子晶格堆積是否與「空間使用率」存在著什麼樣的關係，當配位數的概念與空間使用率的想法相衝突時，離子晶格將如何堆積？

## 貳、研究目的

分子晶格的堆積受到混成軌域的作用，其晶格排列方式必須符合該分子的混成軌域之形狀；而離子晶格的堆積主要是利用陰陽離子間的庫倫靜電力彼此吸引而結合在一起。根據文獻記載[2]，由於離子晶格是一個無限延伸的立體結構，單看陰離子（或陽離子）的部分，可發現陰離子（或陽離子）間的斥力是固定且各分力之向量總和為零，此時將陽離子（或陰離子）考慮其中，則配位數愈多，即陰陽離子間的接觸愈多，表示愈能使該結構更加穩定。

本實驗所要探討的主題是「空間使用率」的概念，本組將依據「平面三角形」、「四面體」、「八面體」、「立方體」等四種結構，討論各個結構中陰陽離子的半徑比改變，其空間使用率的變化情形。最後，進行常見的鹽類密度測定實驗，再依照「四面體」、「八面體」、「立方體」等三種結構去預測離子晶格中的離子鍵長，最後與各離子的文獻值相比較，以證明「空間使用率」的觀點是否正確。

## 參、研究設備及器材

### 一、藥品：

- (一) 氯化鋰 (LiCl)
- (二) 氯化鈉 (NaCl)
- (三) 氯化鉀 (KCl)
- (四) 氯化銫 (CsCl)
- (五) 碘化鈉 (NaI)
- (六) 碘化鉀 (KI)
- (七) 硫化銅 (CuS)
- (八) 硫化鋅 (ZnS)
- (九) 氧化硼 ( $B_2O_3$ )
- (十) 蒸餾水 ( $H_2O$ )
- (十一) 乙醇 ( $C_2H_5OH$ )

### 二、設備及器材：

- (一) 量筒
- (二) 玻棒
- (三) 西卡紙
- (四) 塑膠片 (投影片)

## 肆、研究過程

在離子晶格的部分，本次主要探討是以陰陽離子個數比例為 1:1 的離子化學物，如 CsCl、NaCl、ZnS 等。本次研究可分成三個部分：

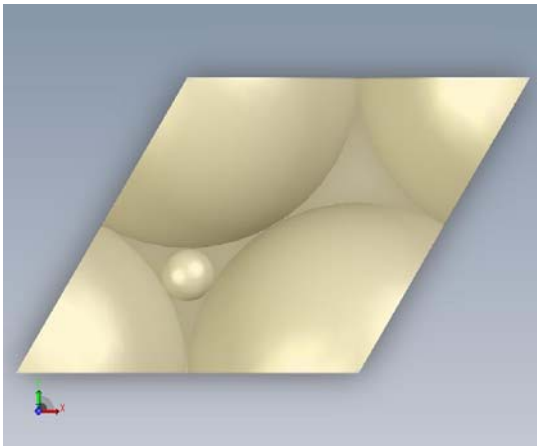
### 一、理想模型的製作：

本組參考中小學小論文中的競賽作品[3]，進行「四面體」、「八面體」、「立方體」等四種結構的模型製作，以便進行實體觀察與理解。

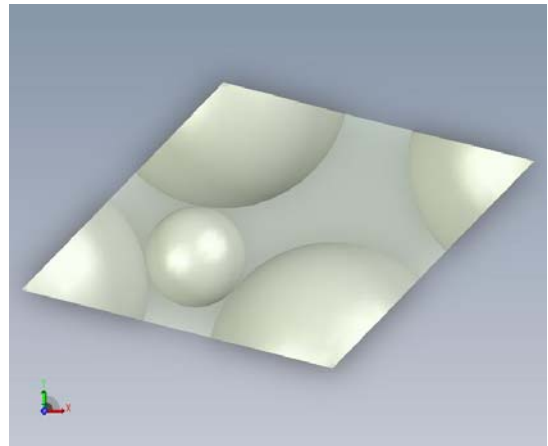
### 二、理想模型的推算

以下分別討論陰陽離子在「平面三角形」、「四面體」、「八面體」、「立方體」等四種結構中，其「空間使用率」情況。為了方便推算，本組假設陰陽離子皆為硬球模型，且在堆積時，無同性電荷相排斥之情形。

(一) 平面三角形 (大球為陰離子且半徑為  $r$ ，小球為陽離子且半徑為  $xr$ )



<圖一>



<圖二>

上面二圖為平面三角形的結構。由圖可以得知，當陽離子夠大的話，它能夠將整個結構撐開，對於此結構，分成下列幾點討論：

1. 若不考慮陽離子的存在，則此結構的空間使用率為：

$$\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{\sqrt{3}}{4} \times (2r)^2 \times 2 \times 2r} = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} = 0.605$$

2. 若考慮陽離子的存在，則陽離子最小必須為多少，才能恰好鑲在陰離子間的洞中：

$$2r \times \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{2}{3} = r + xr = (1+x)r, \quad x = \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 = 0.155$$

3. 承上，以所得之  $x$  值為分界，其空間使用率為：

(1) 當  $0 \leq x < \frac{2}{\sqrt{3}} - 1$  時：

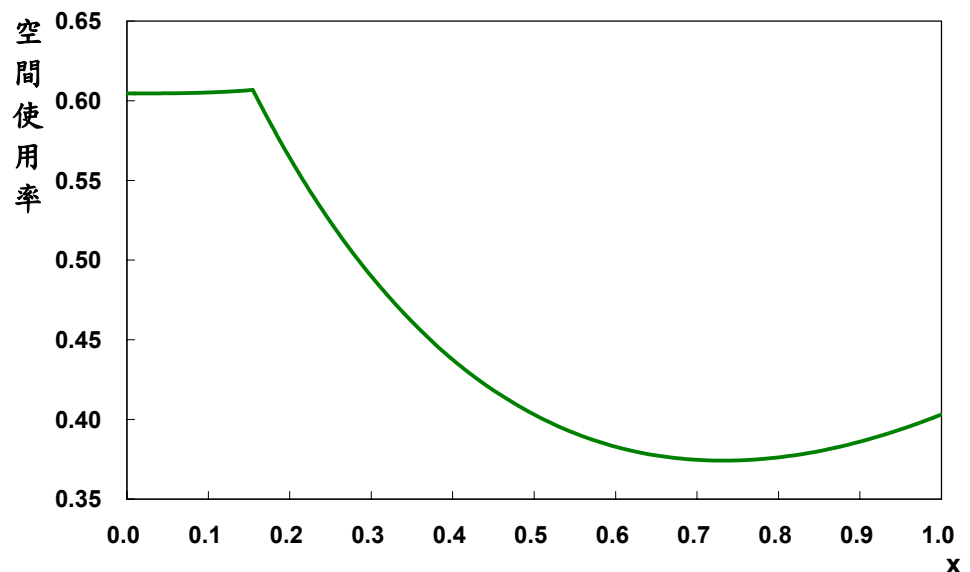
$$\text{則其空間使用率為 } \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi(xr)^3}{\frac{\sqrt{3}}{4} \times (2r)^2 \times 2 \times 2r} = \frac{\pi}{3\sqrt{3}}(1+x^3)$$

(2) 當  $\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \leq x \leq 1$  時，其空間使用率為：

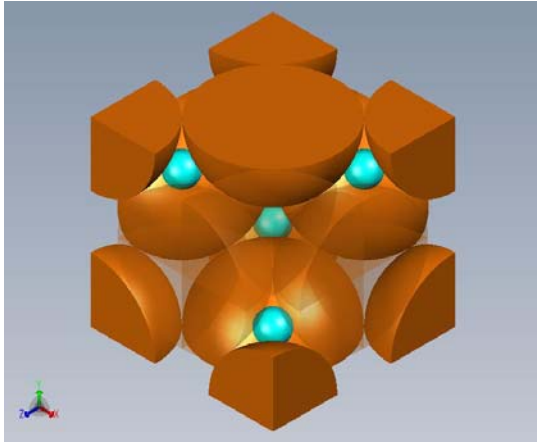
$$\text{此時的晶格邊長為 } (r+xr) \times \frac{3}{2} \times \frac{2}{\sqrt{3}} = \sqrt{3}(1+x)r$$

$$\text{則其空間使用率為 } \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi(xr)^3}{\frac{\sqrt{3}}{4} \times [\sqrt{3}(1+x)r]^2 \times 2 \times 2r} = \frac{4\pi}{9\sqrt{3}} \times \frac{1-x+x^2}{1+x}$$

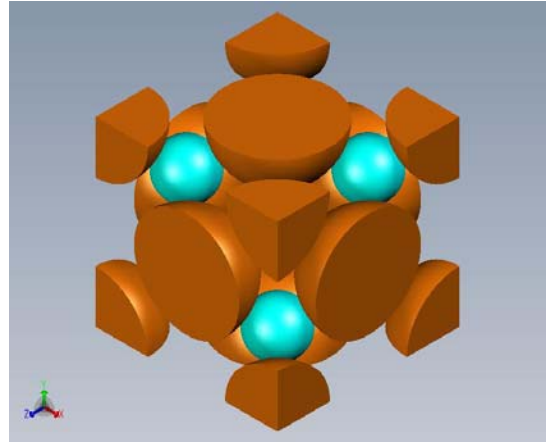
(3) 由上述所得的結果，將空間使用率為縱坐標， $x$  為橫坐標進行作圖，所得之圖形如下：



(二) 四面體 (大球為陰離子且半徑為  $r$ ，小球為陽離子且半徑為  $xr$ )



<圖三>



<圖四>

上面二圖為四面體的結構。由圖可以得知，當陽離子夠大的話，它能夠將整個結構撐開，對於此結構，分成下列幾點討論：

1. 若不考慮陽離子的存在，則：

$$\text{此時的晶格邊長為 } \frac{2r}{\sqrt{2}} \times 2 = 2\sqrt{2}r$$

$$\text{此結構的空間使用率為 } \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 4}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.740$$

2. 若考慮陽離子的存在，則陽離子最小必須為多少，才能恰好鑲在陰離子間的洞中：

$$2r \times \sqrt{\frac{3}{2}} \times \frac{1}{2} = r + xr = (1+x)r, \quad x = \sqrt{1.5} - 1 = 0.225$$

3. 承上，以所得之  $x$  值為分界，其空間使用率為：

- (1) 當  $0 \leq x < \sqrt{1.5} - 1$  時：

$$\text{此時的晶格邊長為 } \frac{2r}{\sqrt{2}} \times 2 = 2\sqrt{2}r$$

$$\text{則其空間使用率為 } \frac{[\frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi(xr)^3] \times 4}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}(1+x^3)$$

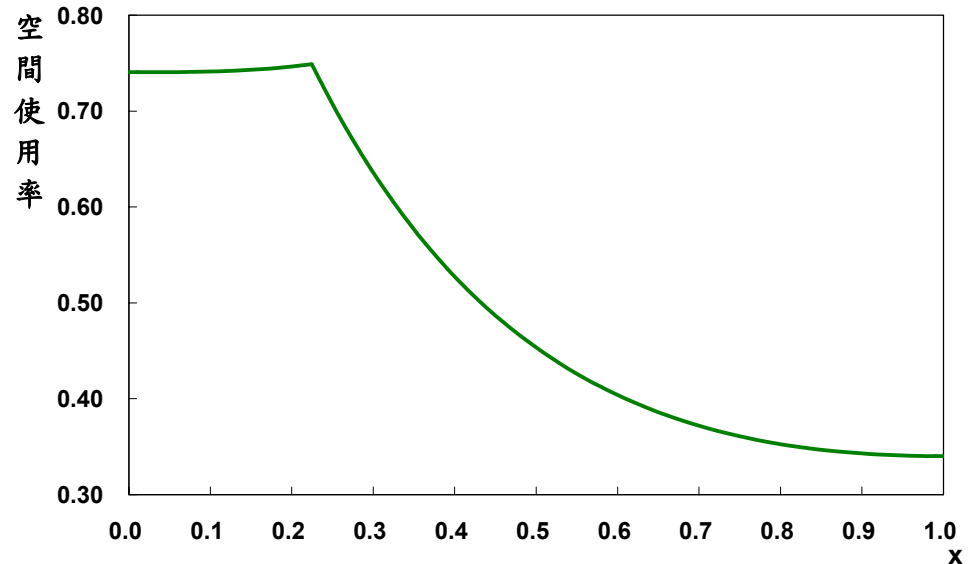
- (2) 當  $\sqrt{1.5} - 1 \leq x \leq 1$  時，其空間使用率為：

$$\text{此時的晶格邊長為 } (r+xr) \times \frac{2}{\sqrt{3}} \times 2 = \frac{4}{\sqrt{3}}(1+x)r$$

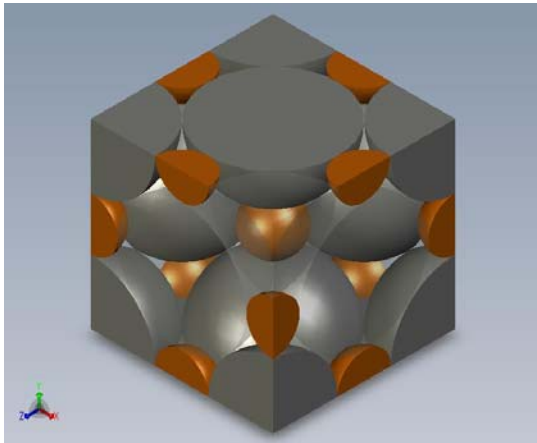


$$\text{則其空間使用率為} \frac{[\frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi(xr)^3] \times 4}{[\frac{4}{\sqrt{3}}(1+x)r]^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{4} \times \frac{1-x+x^2}{(1+x)^2}$$

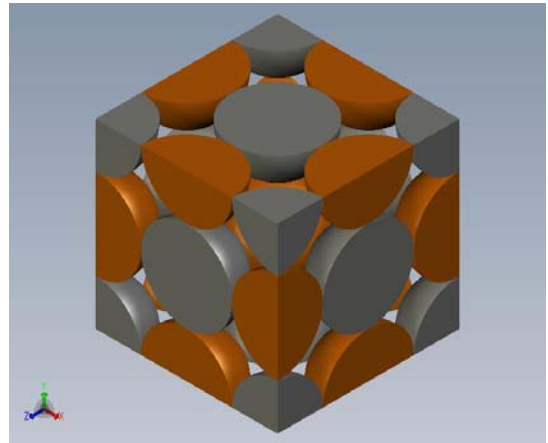
(3) 由上述所得到的結果，將空間使用率為縱坐標，x 為橫坐標進行作圖，所得之圖形如下：



(三) 八面體 (大球為陰離子且半徑為 r，小球為陽離子且半徑為 xr)



<圖五>



<圖六>

上面二圖為八面體的結構。由圖可以得知，當陽離子夠大的話，它能夠將整個結構撐開，對於此結構，分成下列幾點討論：

1. 若不考慮陽離子的存在，則：

$$\text{此時的晶格邊長為} \frac{4r}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2}r$$

$$\text{此結構的空間使用率為} \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \times 4}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.740$$

2. 若考慮陽離子的存在，則陽離子最小必須為多少，才能恰好鑲在陰離子間的洞中：

$$\frac{4r}{\sqrt{2}} = (r + xr) \times 2 = 2 \times (1 + x)r, \quad x = \sqrt{2} - 1 = 0.414$$

3. 承上，以所得之  $x$  值為分界，其空間使用率為：

- (1) 當  $0 \leq x < \sqrt{2} - 1$  時：

$$\text{此時的晶格邊長為 } \frac{4r}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2}r$$

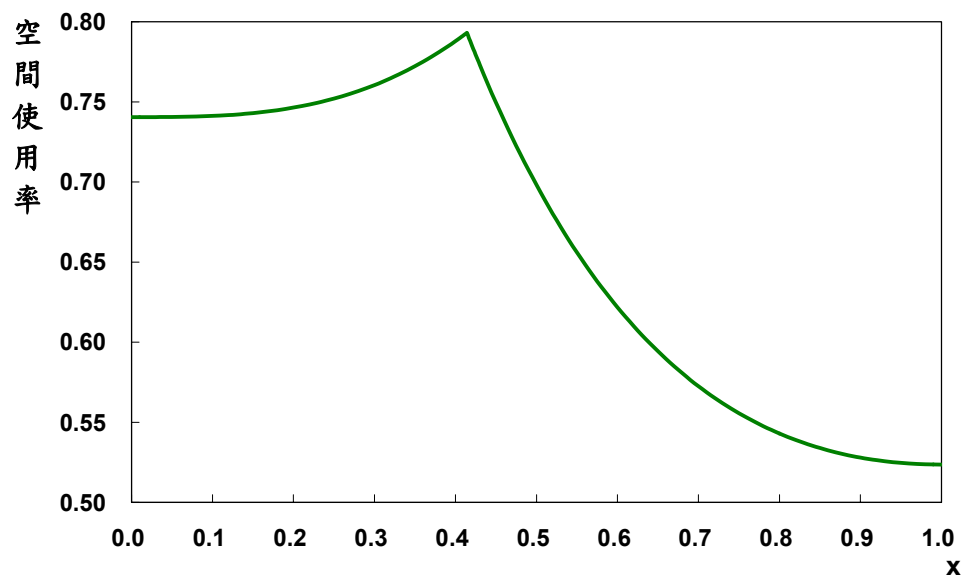
$$\text{則其空間使用率為 } \frac{\left[ \frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi(xr)^3 \right] \times 4}{(2\sqrt{2}r)^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}(1 + x^3)$$

- (2) 當  $\sqrt{2} - 1 \leq x \leq 1$  時，其空間使用率為：

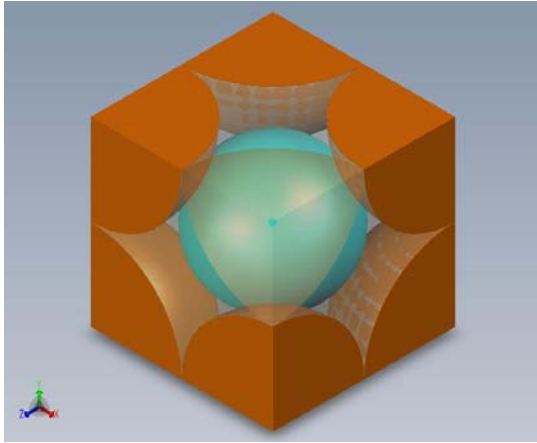
$$\text{此時的晶格邊長為 } (r + xr) \times 2 = 2 \times (1 + x)r$$

$$\text{則其空間使用率為 } \frac{\left[ \frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi(xr)^3 \right] \times 4}{[2 \times (1 + x)r]^3} = \frac{2\pi}{3} \times \frac{1 - x + x^2}{(1 + x)^2}$$

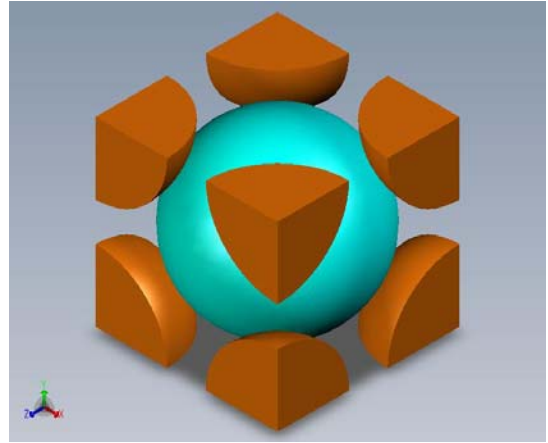
- (3) 由上述所得的結果，將空間使用率為縱坐標， $x$  為橫坐標進行作圖，所得之圖形如下：



(四) 立方體 (大球為陰離子且半徑為  $r$ ，小球為陽離子且半徑為  $xr$ )



<圖七>



<圖八>

上面二圖為立方體的結構。由圖可以得知，當陽離子夠大的話，它能夠將整個結構撐開，對於此結構，分成下列幾點討論：

1. 若不考慮陽離子的存在，則此結構的空間使用率為：

$$\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} = 0.524$$

2. 若考慮陽離子的存在，則陽離子最小必須為多少，才能恰好鑲在陰離子間的洞中：

$$2r \times \sqrt{3} = (r + xr) \times 2 = 2 \times (1 + x)r, \quad x = \sqrt{3} - 1 = 0.732$$

3. 承上，以所得之  $x$  值為分界，其空間使用率為：

- (1) 當  $0 \leq x < \sqrt{3} - 1$  時：

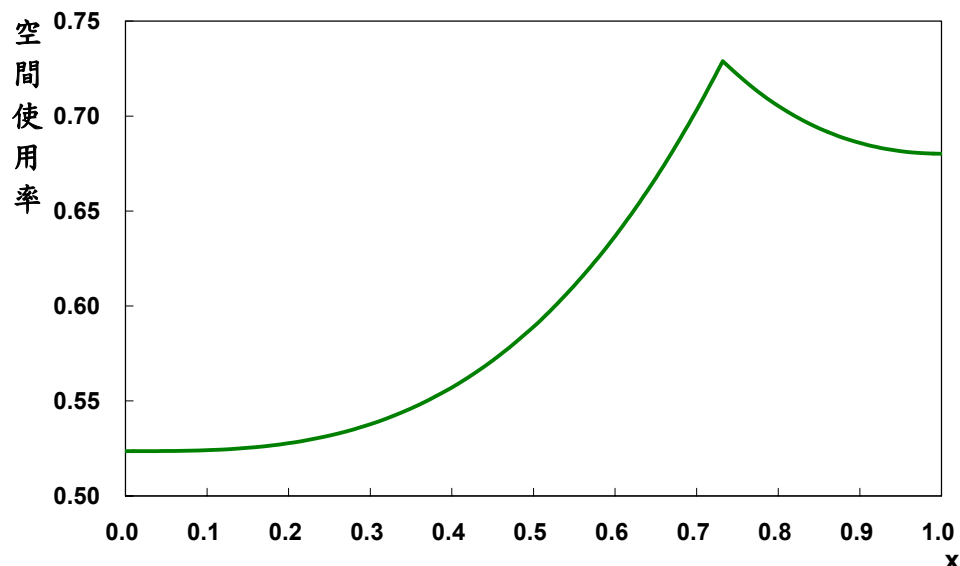
$$\text{則其空間使用率為 } \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi (xr)^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6}(1 + x^3)$$

- (2) 當  $\sqrt{3} - 1 \leq x \leq 1$  時，其空間使用率為：

$$\text{此時的晶格邊長為 } (r + xr) \times \frac{2}{\sqrt{3}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \times (1 + x)r$$

$$\text{則其空間使用率為 } \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 + \frac{4}{3}\pi (xr)^3}{\left[\frac{2}{\sqrt{3}} \times (1 + x)r\right]^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{2} \times \frac{1 - x + x^2}{(1 + x)^2}$$

- (3) 由上述所得到的結果，將空間使用率為縱坐標， $x$  為橫坐標進行作圖，所得之圖形如下：



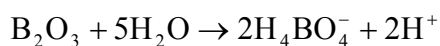
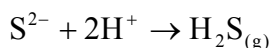
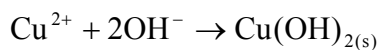
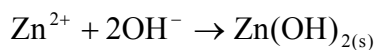
### 三、鹽類密度的測定

本組選用幾種常見的鹽類，進行密度的測定，再利用得到的密度值來預測四面體、八面體、立方體等三種結構，其離子鍵長為何，最後與文獻[4]上的離子鍵長相比較，探討與否與該離子鍵長吻合。本組所使用的量測方法如下：

- (一) 將待測鹽類取部分溶於溶劑中，使之形成飽和溶液。
- (二) 將上述之飽和溶液置於量筒中，再稱取一定量該待測鹽類置入其中。
- (三) 觀測該鹽類加入後，其量筒液面所上升的量值，最後依據下列公式來計算密度：

$$\text{密度 (g/mL)} = \frac{\text{質量 (g)}}{\text{體積 (mL)}}$$

本組一開始使用水作為溶劑，來進行密度的量測，然而其中三氧化二硼、硫化鋅與硫化銅溶解在水中會產生其它的化學變化，如下列反應方程式所示：

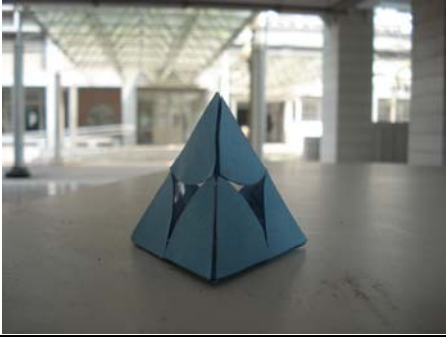
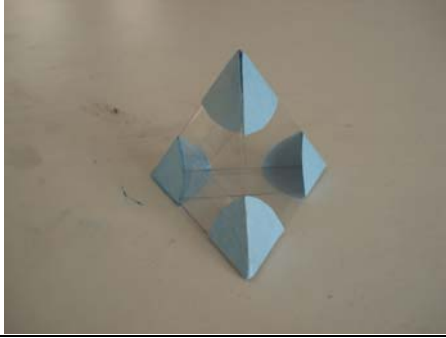

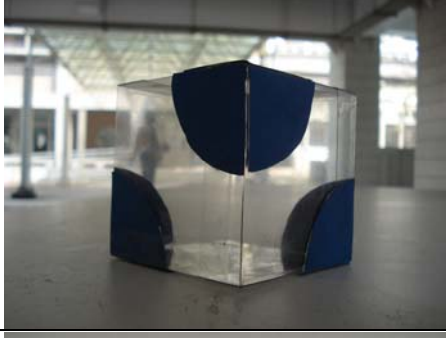
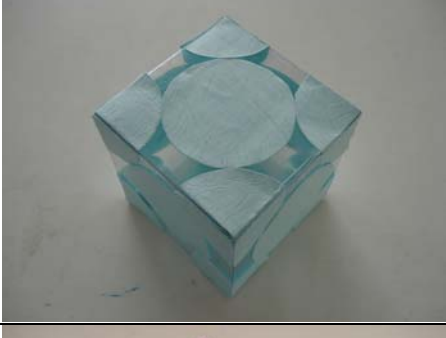
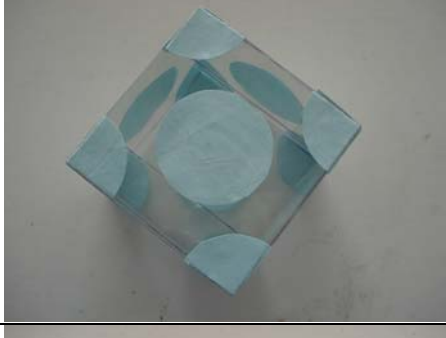

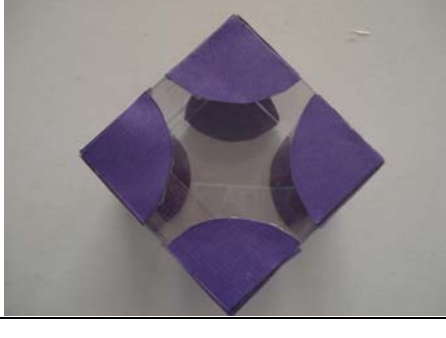


本組在實驗過程中，也確實有聞到似硫化氫的皮蛋臭味。由於上述所列的反應方程式，如果用水量測將有很大的誤差，故本組對於硫化鋅與硫化銅不用水量測，而改採用乙醇作為溶劑進行量測。

## 伍、實驗結果

### 一、理想模型的製作

本組所製作之模式樣式如下所示：(樣品製作僅考慮陰離子的堆積)

結構名稱	陰離子彼此緊密相切	陰離子受陽離子變大而相離
四面體-1		
四面體-2		
八面體		
立方體		

### 二、理想模型的推算

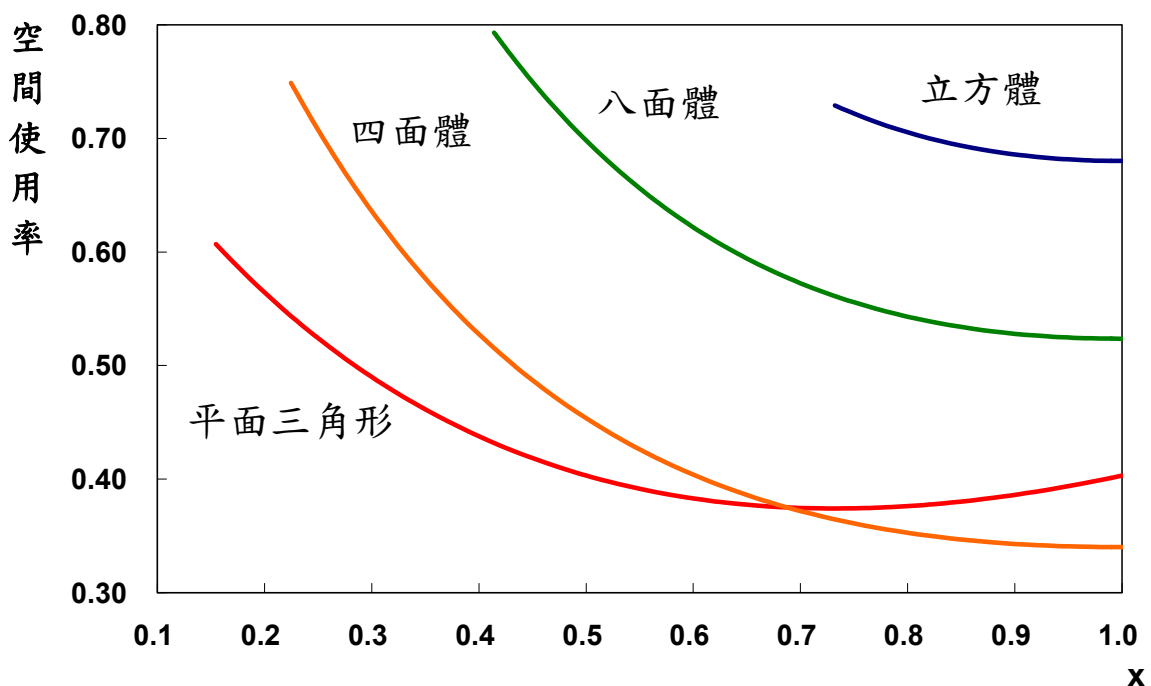
本組將「研究過程」中「理想模型的推算」之結果整理如下表所示：

項目	平面三角形	四面體	八面體	立方體
----	-------	-----	-----	-----

僅有陰離子 空間使用率	$\frac{\pi}{3\sqrt{3}} = 0.605$	$\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.740$	$\frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0.740$	$\frac{\pi}{6} = 0.524$
陽陰離子最小半 徑比	$\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 = 0.155$	$\sqrt{1.5} - 1 = 0.225$	$\sqrt{2} - 1 = 0.414$	$\sqrt{3} - 1 = 0.732$
未達陽陰離子最 小半徑比之空間 使用率	$0 \leq x < \frac{2}{\sqrt{3}} - 1$	$0 \leq x < \sqrt{1.5} - 1$	$0 \leq x < \sqrt{2} - 1$	$0 \leq x < \sqrt{3} - 1$
	$\frac{\pi}{3\sqrt{3}}(1+x^3)$	$\frac{\pi}{3\sqrt{2}}(1+x^3)$	$\frac{\pi}{3\sqrt{2}}(1+x^3)$	$\frac{\pi}{6}(1+x^3)$
超過陽陰離子最 小半徑比之空間 使用率	$\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \leq x \leq 1$	$\sqrt{1.5} - 1 \leq x \leq 1$	$\sqrt{2} - 1 \leq x \leq 1$	$\sqrt{3} - 1 \leq x \leq 1$
	$\frac{4\pi}{9\sqrt{3}} \times \frac{1-x+x^2}{1+x}$	$\frac{\sqrt{3}\pi}{4} \times \frac{1-x+x^2}{(1+x)^2}$	$\frac{2\pi}{3} \times \frac{1-x+x^2}{(1+x)^2}$	$\frac{\sqrt{3}\pi}{2} \times \frac{1-x+x^2}{(1+x)^2}$

由上表來看，如果僅考慮單一種離子（即陰離子）的堆積，可以發現四面體與八面體的空間使用率是最好的。然而離子化合物並非只有一種離子的堆積，因此必須考量陰陽離子堆積所造成的變化。

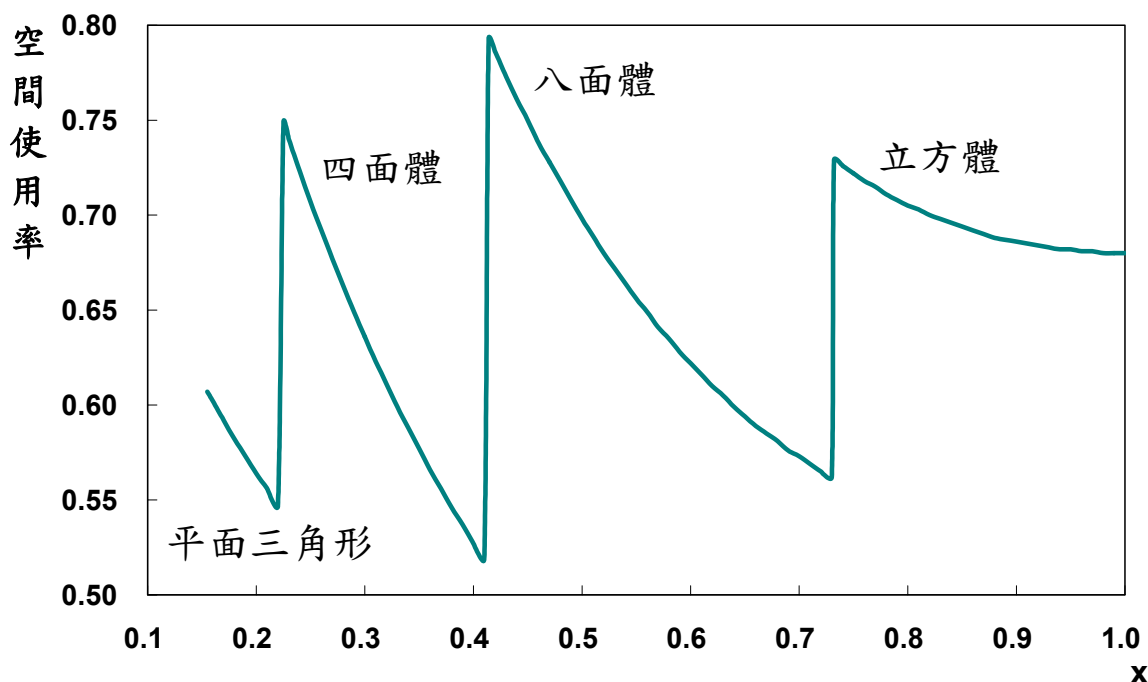
若僅考慮各類結構其陰陽離子皆能彼此接觸到的情形，將各類結構的空間使用率繪到同一個圖表之中，如下圖所示：



由上圖可以發現，當陽陰離子之半徑比  $x$  由 0 開始時，其結構只能以平面三角形的方式呈現。隨著半徑比  $x$  逐漸增大，當  $x \geq \sqrt{1.5} - 1 = 0.225$  時，就多了四面體的結構可以選擇，而平面三角形與四面體的結構是以四面體的空間使用率最高，離子化合物應以四面體結構進行堆積。同理，當  $x \geq \sqrt{2} - 1 = 0.414$  時，就多了八面體的結構可以選擇，而

四面體與八面體的結構是以八面體的空間使用率最高，離子化合物應以八面體結構進行堆積。亦同理，當  $x \geq \sqrt{3} - 1 = 0.732$  時，就多了立方體的結構可以選擇，而八面體與立方體的結構是以立方體的空間使用率最高，離子化合物應以立方體結構進行堆積。

根據上述之結果，本組重新將空間使用率與各類結構之關係整理成一新圖形，如下圖所示：



由上圖可清楚發現隨著陽陰離子之半徑比的增加，再加上「空間使用率」的考量，其離子化合物將以何種結構進行堆積，可以整理出下列之表格：

陽陰離子半徑比 (x)	最大空間使用率之結構	配位數
$0.155 = \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \leq x < \sqrt{1.5} - 1 = 0.225$	平面三角形	3
$0.225 = \sqrt{1.5} - 1 \leq x < \sqrt{2} - 1 = 0.414$	四面體	4
$0.414 = \sqrt{2} - 1 \leq x < \sqrt{3} - 1 = 0.732$	八面體	6
$0.732 = \sqrt{3} - 1 \leq x < 1$	立方體	8

由上表發現，空間使用率的概念與配位數的想法不謀而合，也就是此兩種想法不僅不會互相抵觸，甚至是互相加成的；換句話說，在改變離子晶格堆積結構的同時，不僅因為配位數的增加而大大地降低了離子晶格的位能，還能夠使離子堆積有最佳的空間使用率，使離子晶格有最「緊實」的結構。

### 三、鹽類密度的測定

本組將所測得各鹽類的密度，再依據四面體、八面體、立方體等結構去預測其離子鍵長，而所得之結果如下表所示：

鹽類	式量	密度	離子鍵長，即陰陽離子之半徑和 (pm)				陽陰離子之半徑比 (x)
			四面體	八面體	立方體	文獻值	
LiCl	42.5	2.12	221	255	279	249	0.376
NaCl	58.5	2.17	244	282	308	278	0.536
KCl	74.5	1.90	277	319	348	314	0.735
CsCl	168.5	4.76	267	309	337	348	0.923
NaI	150	3.65	281	324	354	317	0.441
KI	166	3.10	307	354	387	353	0.605
CuS	95.5	3.04	257	297	324	256	0.391
ZnS*	97.5	4.02	236	272	297	258	0.402
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> *	69.6	2.42	173	200	218	137	—

\*備註：ZnS、B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 由於與預測有較大的出入，將於最後於「討論」處詳加探討。



## 陸、討論

### 一、文獻探討

關於「研究動機」所述的問題，本組查閱相關的文獻中，發現對此問題的解釋仍然是配位數愈多愈好，這是大部分的人都認同的一種道理，但是其中一文獻[5]中，提到「Principles of Laves」。此定理主要是用來解釋離子晶格結構，而此原理一共提到三個原理來說明：

- (一) 空間原理 (Space principles)：空間的使用要有效率。
- (二) 對稱性原理 (Symmetry principles)：晶格排列有最高對稱性。
- (三) 連接原理 (Connection principles)：配位數為最大值。

Laves 定理的第一點正好與本組的想法不謀而合，而第三點正好是目前「離子晶格堆積」課程教材中常見的說法—「配位數」論點。

從本研究的理想模型推算，可以發現「空間使用率」與「配位數」是不會互相衝突的，甚至還能相輔相成。從所得之結果來說，隨著陽陰離子半徑比的增加，其離子晶格堆積結構會有所改變，而改變後能夠使空間使用率趨於最大，且增加配位數，讓整個晶格位能更加穩定。

### 二、鹽類結構的探討

鹽類	式量	密度	實際結構	鍵長	文獻值	誤差	半徑比 (x)	理論結構
LiCl	42.5	2.12	八面體	255	249	2.41%	0.376	四面體
NaCl	58.5	2.17	八面體	282	278	1.44%	0.536	八面體
KCl	74.5	1.90	八面體	319	314	1.59%	0.735	立方體
CsCl	168.5	4.76	立方體	337	348	3.16%	0.923	立方體
NaI	150	3.65	八面體	324	317	2.21%	0.441	八面體
KI	166	3.10	八面體	354	353	0.28%	0.605	八面體
CuS	95.5	3.04	四面體	257	256	0.39%	0.391	四面體

備註 1：鍵長，即陰陽離子之半徑和 (pm)  
備註 2： $\frac{|\text{鍵長} - \text{文獻值}|}{\text{文獻值}} \times 100\%$

根據本組經由鹽類密度的量測推算所得到各種結構的離子鍵長與文獻值的離子鍵長

相比較之後，發現 LiCl、NaCl、KCl、CsCl、NaI、KI、CuS 等鹽類，在該結構與離子鍵長的配對皆與實際情形吻合。

然而，若將從文獻值上所查到的陰陽離子之半徑長，進行陽陰離子之半徑比，卻發現氯化鋰 (LiCl) 應該為四面體的結構、氯化鉀 (KCl) 應該為立方體的結構。對於此情形，本組亦查閱相關文獻[6]而得到另一個有趣的現象，即陰陽離子並非是硬球模型，它們會隨著配位數的不同，而有不一樣的離子半徑，其相關性如下表所示：

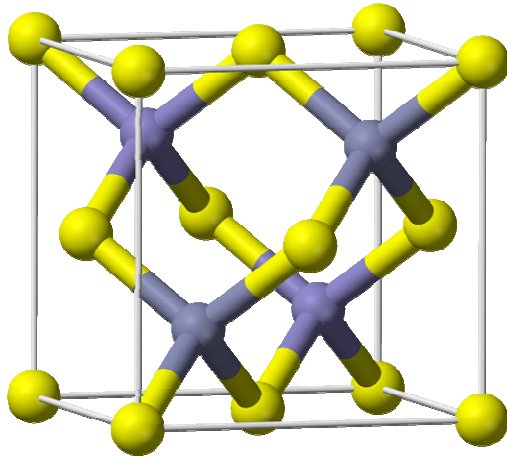
離子	離子半徑 (pm)		
	配位數=4	配位數=6	配位數=8
Li <sup>+</sup>	59	76	
Na <sup>+</sup>	99	102	118
K <sup>+</sup>		138	
Cs <sup>+</sup>		167	177
Cl <sup>-</sup>		181	184
O <sup>2-</sup>	138	140	142

若將氯化鋰與氯化鉀的陽陰離子半徑比重新用上表的數值進行計算，將可以得到另一新的結果：LiCl 的  $x=0.420$  正好落在四面體結構的區域。而 KCl 的  $x=0.762$  仍然落在立方體結構的區域，然而因為氯離子的電負度很大，若以立方體的結構組成，則陰離子間的距離較短，相對於四面體的結構來說，其陰離子間的排斥力則可以降低較多，故 KCl 仍以四面體的結構進行堆積。

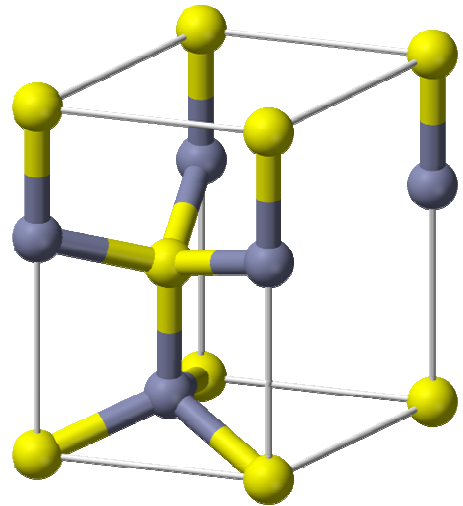
### 三、硫化鋅 (ZnS) 與氧化硼 (B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)

#### (一) 硫化鋅

經由本實驗所測得的密度，再進行離子鍵長的推測，卻發現離子鍵長之文獻值是介在四面體與八面體的預測值之間，因此本組查閱文獻值發現硫化鋅的密度是介在 3.98~4.07 g/cm<sup>3</sup> 之間，而本組所測得的密度為 4.02 g/cm<sup>3</sup>，正好落在文獻值的範圍內，此與預期結果有很大的出入。然而，文獻[7]上也提到硫化鋅雖然是四面體的組成，但是仍可分成兩種結構，分別是 Sphalerite 結構與 Wurtzite 結構，如下圖所示，故本組推測是否與結構有關係。



Sphalerite 結構



Wurtzite 結構

本組利用文獻上提供的硫化鋅鍵長（該鍵長為 258 pm）進行密度的推測，結果發現，不論是 Sphalerite 結構或 Wurtzite 結構，其密度都應是  $3.06 \text{ g/cm}^3$  才是。對於硫化鋅的結構與密度的推測有這樣的出入，文獻上並沒有探討到這層關係，因此本組大膽地推測由於硫化鋅有兩種結構混合進行晶格堆積，其密度與結構之間的關係已無法簡單地預測。

## （二）氧化硼

由於硼為非金屬元素，故硼與氧之間主要是以共價鍵之型式進行鍵結，而氧化硼正是以「 $sp^2$ 」混成軌域鍵結，該形狀正是平面三角形。從「實驗結果」的部分，可以發現氧化硼不可能以四面體、八面體或立方體等結構的型式出現。

然而，若是以平面三角形的型式，本組以該鍵長的文獻值進行密度的推算，其密度應在  $4\sim 6 \text{ g/cm}^3$  之間，但是實驗測得的密度為  $2.42 \text{ g/cm}^3$ ，而密度的文獻值為  $2.55 \text{ g/cm}^3$ ，故氧化硼並非所一般教科書上所述，是利用離子晶格進行緊密地堆積，反而應是以極為鬆散且不規則的方式進行堆積，這樣才能讓該化合物的密度明顯下降。

## 柒、結論

經過理論的推算，本組成功地發現在大自然界中，離子晶格堆積會遵循「最大的空間使用率」來進行堆積，且此概念並不會與配位數的想法相互衝突，反而是相輔相成，使離子晶格更加地穩定、有效率。其關係如下表所示：

陽陰離子半徑比 (x)	最大空間使用率之結構	配位數
$0.155 = \frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \leq x < \sqrt{1.5} - 1 = 0.225$	平面三角形	3
$0.225 = \sqrt{1.5} - 1 \leq x < \sqrt{2} - 1 = 0.414$	四面體	4
$0.414 = \sqrt{2} - 1 \leq x < \sqrt{3} - 1 = 0.732$	八面體	6
$0.732 = \sqrt{3} - 1 \leq x < 1$	立方體	8

從實驗的部分驗證，經由鹽類密度的量測中發現，大部分的鹽類是遵循上述的規則，但是仍然有部分鹽類是例外，此情況亦如同文獻[2]中所遭遇之情況相同。換言之，關於離子晶格堆積是複雜的，但是生活中大多數的鹽類仍可利用如「空間使用率」或「配位數」等概念來簡易地解釋。大體而言，大自然在晶格堆積中所扮演著是一位相當有智慧的倉庫管理員。

## 捌、參考資料及其他

1. 高中化學（三上） 翰林版
2. L. C. Nathan, *J. Chem. Educ.*, **1985**, 62, 215.
3. 動手玩創意—晶體製作 許雅喻著 彰化女中
4. 化學 曾國輝編著 藝軒出版社
5. [http://www.chem.ox.ac.uk/icl/heyess/structure\\_of\\_solids/Lecture3/Lec3.html#anchor1](http://www.chem.ox.ac.uk/icl/heyess/structure_of_solids/Lecture3/Lec3.html#anchor1)
6. R. D. Shannon, *Acta Crystallographica*, **1976**, A32, 751.
7. [http://en.wikipedia.org/wiki/Zinc\\_sulfide](http://en.wikipedia.org/wiki/Zinc_sulfide)

**【評語】** 040208

作品能將數學應用於化學上作為解釋，其想法相當獨具；但文獻搜集及探討需再加強。