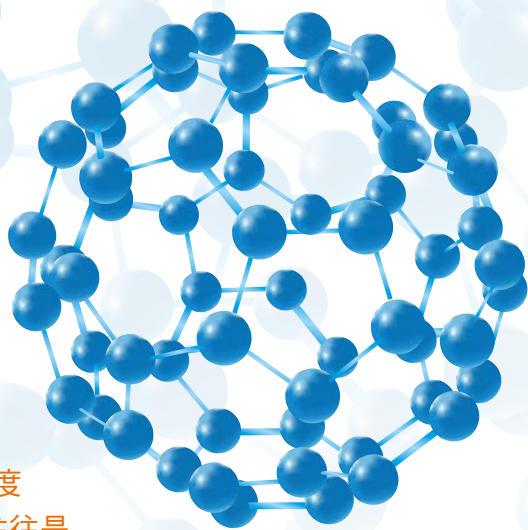


從碳簇、準晶到 Zometool 的 化學世界

文／金必耀

本月專題——化學展示



現代化學的研究重心在探索分子結構與其性質，分子結構的大小就在奈米尺度，因此化學研究與奈米科技有著相當程度的重疊。要了解各種化學現象的第一步，往往是弄清楚奈米結構，然後才能真正認識這些現象的運作機制。而各種奈米尺度的分子結構基本上是原子在空間排列的幾何問題。然而了解原子在三度空間的排列並非易事，借助適當的計算機模擬與各種實體模型的建構，可以有效地增進我們對分子結構的認識。

本文介紹一種強大的數學組合模型—— Zometool，可用來建構各種有趣的立體幾何結構，適當的運用，更可以製作出微觀分子結構的巨型模型，不僅具有一定的科學意涵，而且其本身更是一件值得不斷玩味的藝術作品。我的實驗室伙伴在過去數年，利用這種組合模型，設計並建構了三個大型的奈米結構，分別是奈米碳洋蔥球、準晶、以及超級巴克球，其中碳洋蔥球和準晶永久陳列位在國立臺灣科學教

育館，而超級巴克球則放置在臺灣大學化學系積學館的大廳。

Zometool 模型

在開始說明這三個模型前，我簡單地介紹 Zometool 模型。Zometool 是由 zome 與 tool（工具）兩個英文字所組成的複合字，其意義為用來做 zome 的工具。而 zome 是由 Steve Durkee 在 1968 年所新創的

英文字，是從 dome 與 zonohedron 兩個字所結合而成：dome 指的是穹頂，是一種在西方常見的建築結構，其外形近似一個空心球體的上半部；而 zonohedron 則代表滿足某一些幾何條件的多面體。1960 年代，美國發明家 Steve Baer 從這些概念，發展出一種數學模型建構玩具，接著慢慢改良，逐漸發展為現在已經標準化的 Zometool 模型。與這類模型相關的數學與幾何，則稱為 zome systems，或是 zome 數學。最近臺灣代理商將這種模型音譯為「龍圖兒」，但似乎不能呈現 Zometool 所代表諸多含意，所以本文還是暫時使用其原文。

Zometool 是一種球桿模型，由連接球（Zomeball）與不同長度與形狀的長桿所組成，如圖 1 所示。它非常類似化學家用來建構各種分子的球桿模型，其中的球代表原子，而桿則代表連接兩個原子的化學鍵。然而，仔細檢視 Zometool 與一般常見的分子球桿模型，會發現仍有許多重要的差異。一般分子中的原子以一價到六價的方式與其它原子相結合，價數基本上就是環繞在原子旁的化學鍵數目。例如，氫原子為一價，只能用一個化學鍵與其它原子相結合，一旦用掉這個鍵，就無法再與另一個原子再結合。因此，氫原子與另一個氫原子結合成一個氫分子，就不會與其他原子進一步再結合。另外，四價的碳原子則比較複雜，可以用四個化學鍵沿正四面體的四個頂點方向，與其四個原子形成四個化學鍵，烷類分子與鑽石中的碳原子便是用這種方式結合的；但是碳也可以用接近平面方式的三個化學鍵與其它碳原子結合，在此情形，碳原子第四個價電子會形成所謂的 π 鍵，烯類分子、芳類分子、奈米碳管、與石墨中的碳原子均是以這種方式形成鍵結。當分子中含由過渡金屬或是第三週期以上較重元素的原子時，

這些原子則有可能以五或六等更高的價數方式結合。

因此，化學教學與研究上常用的球桿模型，球面上通常會有一至六個孔洞，用來描述這些不同的體系的價數。Zometool 中所使用的連接球是小斜方截半二十面體的變體，小斜方截半二十面體是十三個阿基米德體中的一個，也是一種 zonohedron，這可能是為什麼稱這種組裝模型為 Zometool 的原因之一。小斜方截半二十面體由 20 個正三角形、30 個正方形、及 12 個正五邊形所組成，在這 62 個面上打出三種不同形狀的孔，便是 Zomeball 設計的基本想法。然而小斜方截半二十面體上三種正多邊形的面積差異頗大，面積比例為 0.433:1:1.72，代表插在不同正多邊形上的桿子接頭的粗細會很不一樣，這會導致操作上不易，所製成的模型也會不結實。真正 Zomeball 用的是稍為變形的小斜方截半二十面體，三角形的孔較大，而正方形變成長寬比約為 1.618 的黃金分割長方形，此時這三個多邊形的面積比比較接近，比例為 1.13:1.618:1.72。

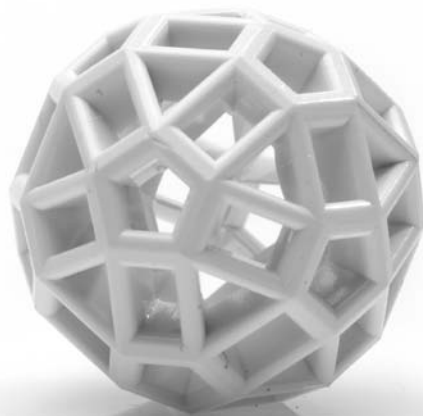


圖 1：Zometool 的連接球（John Waugh 攝）。



Zomeball 上共有 62 個孔，遠超過一般原子所能形成的化學鍵數目，似乎代表我們可以用 Zometool 建構任意分子的立體構造，然而這並非是實際的情形，主要的原因是 Zomeball 的孔洞設計是固定在特定位向，連接 Zomeball 的桿子非常堅硬，不具足夠的彈性，因此這些球桿只能出現在空間的特定位置與方向上。然而環繞在原子旁的化學鍵數目雖少，但其位向則可能採取各種角度，以致 Zometool 應用在分子模型的建構上仍有一定的侷限性。

Zometool 應用

知道了 Zometool 模型在化學應用上的優缺點，我接下來闡述這幾個 Zometool 應用在奈米結構的成功實例。

一、多層碳洋蔥球

芙類分子是一大類由碳原子所組成的籠形多面體結構，有時簡稱為碳簇，這種多面體通常僅含五邊形與六邊形，其中最對稱的一類芙類分子是具有正二十面體形狀的高柏格多面體（Goldberg

polyhedra），這種芙類分子的十二個正五邊形位在正二十面體的十二個頂點位置，從任一個五邊形走到相鄰的另一個五邊形的邊，可以用兩個整數 (h, k) 來表示，簡稱手性向量，其中 h 與 k 為非負的整數且 $h \geq k \geq 0$ ，但不可同時為零。所以最小的高柏格多面體滿足 $(h, k)=(1, 0)$ ，對應到正

十二面體，或是碳二十分子；下一個高柏格多面體的手性向量為 $(h, k)=(1, 1)$ ，為截頂正二十面體，也就是出名的碳六十分子，有時暱稱為巴克球。高柏格多面體的頂點數目可以由 $V=20(h^2+k^2+hk)$ 算出，從小到大，具有正二十面體對稱的芙類分子的碳原子數目為 20、60、80、140、180...。 $h \neq k$ 的高柏格多面體有鏡像異構物，一個分子的鏡像與其本身無法通過平移與旋轉重合，我們就稱此分子具有手性或是掌性。

我們用 Zometool 製作的碳洋蔥球模型是由六層的高柏格多面體所組成的同心球體，由內到外每層分別含有 20、80、



圖 2：2011 年諾貝爾化學獎得主丹謝特曼 (Dan Shechtman) (左二)、范原嘉 (左一)、柯星宇 (右二) 與本文作者 (左三) 於 2012 年攝於臺北科技大學所舉行的國際準晶會議。

180、320、500、720 個碳原子，對應到的手性向量為 $(h, 0)$ ， $h=1, 2, 3, 4, 5, 6$ ，如圖 2 所示。目前就我們所知，Zometool 似乎只能用來製作不具掌性的高柏格多面體。除了此系列外，另一個可以用 Zometool 製作的高柏格多面體系列，是包含碳六十、手性向量為 (h, h) ， $h=1, 2, 3...$ 的系列，對應

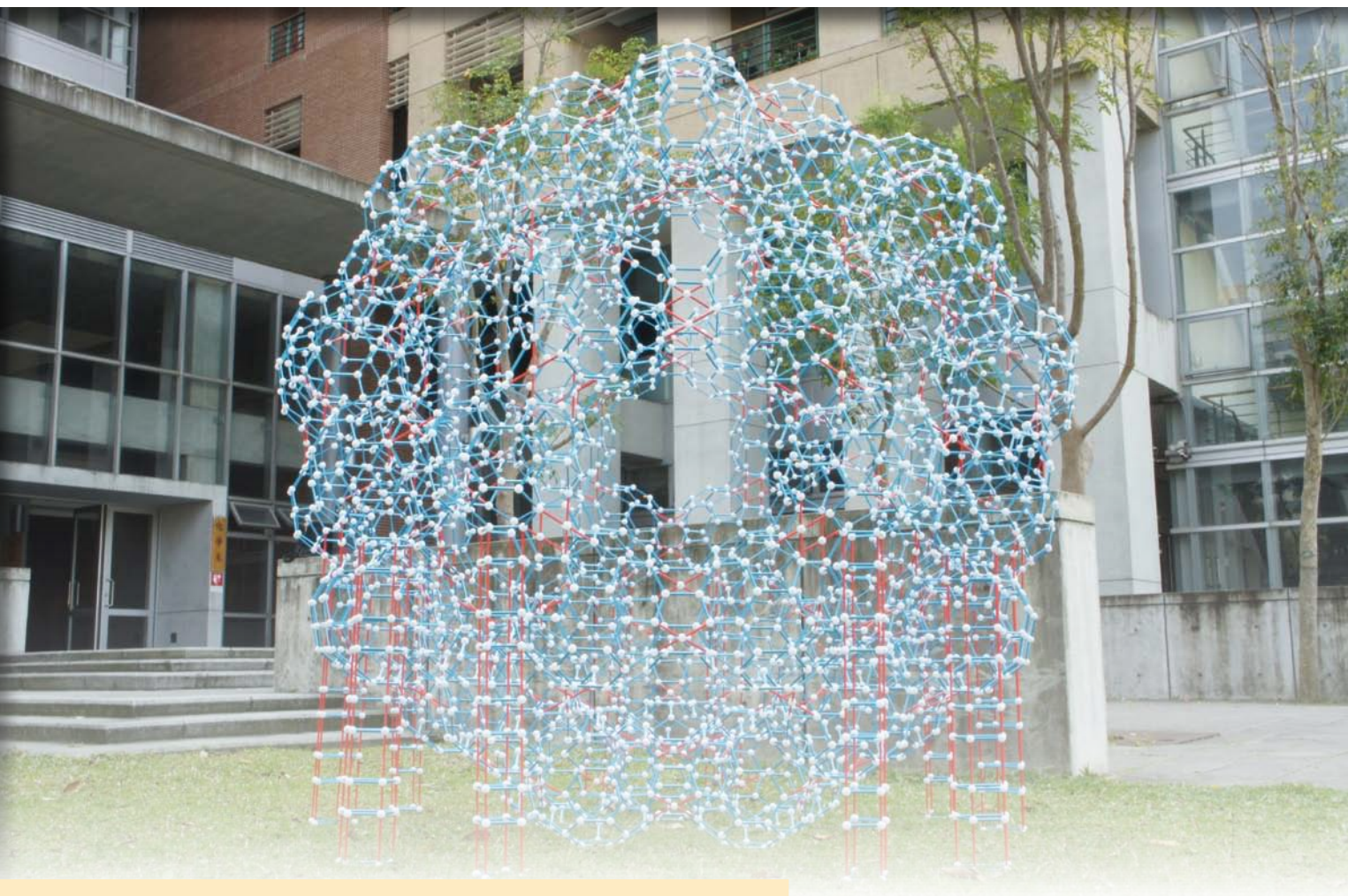


圖 3：超級巴克球，地點：臺灣大學化學系積學館外。（余筱嵐 攝）

到的碳數為 60、240、540、960、...，有興趣的讀者不妨嘗試使用 Zometool 來建構這類分子。

二、超級巴克球

超級芙類分子是一類以碳六十或是其他籠形芙類分子為組成單元，通過適當的方式融合而成的巨型融合碳簇，它仍然是一種芙類分子，所有的碳原子均是三價的。一個特別的情形是用六十個碳六十融合成一個巨型的巴克球，這是作者在幾年前所提出的一種穩定的假想奈米結構，由於這種兩階層分子可以再做為新的組成單元，

做成更大的三階層巴克球，然後反覆下去，無限延伸，形成類似數學上的 Sierpinski 碎形結構，所以我們也可稱此種新型態碳結構為 Sierpinski 巴克球。

相鄰的兩個碳六十可以有許多不同的融合方式，如果是沿五重軸融合，所得到的 Sierpinski 巴克球的鍵角變化不能用 Zometool 模型做出來，卻可以用串珠模型製作出來。今年初，我過去的學生莊宸發現，若是透過碳六十的三個二重旋轉軸的方向相互結合，可以產生與 Zometool 模型完全匹配的超級巴克球。圖 3 所示即

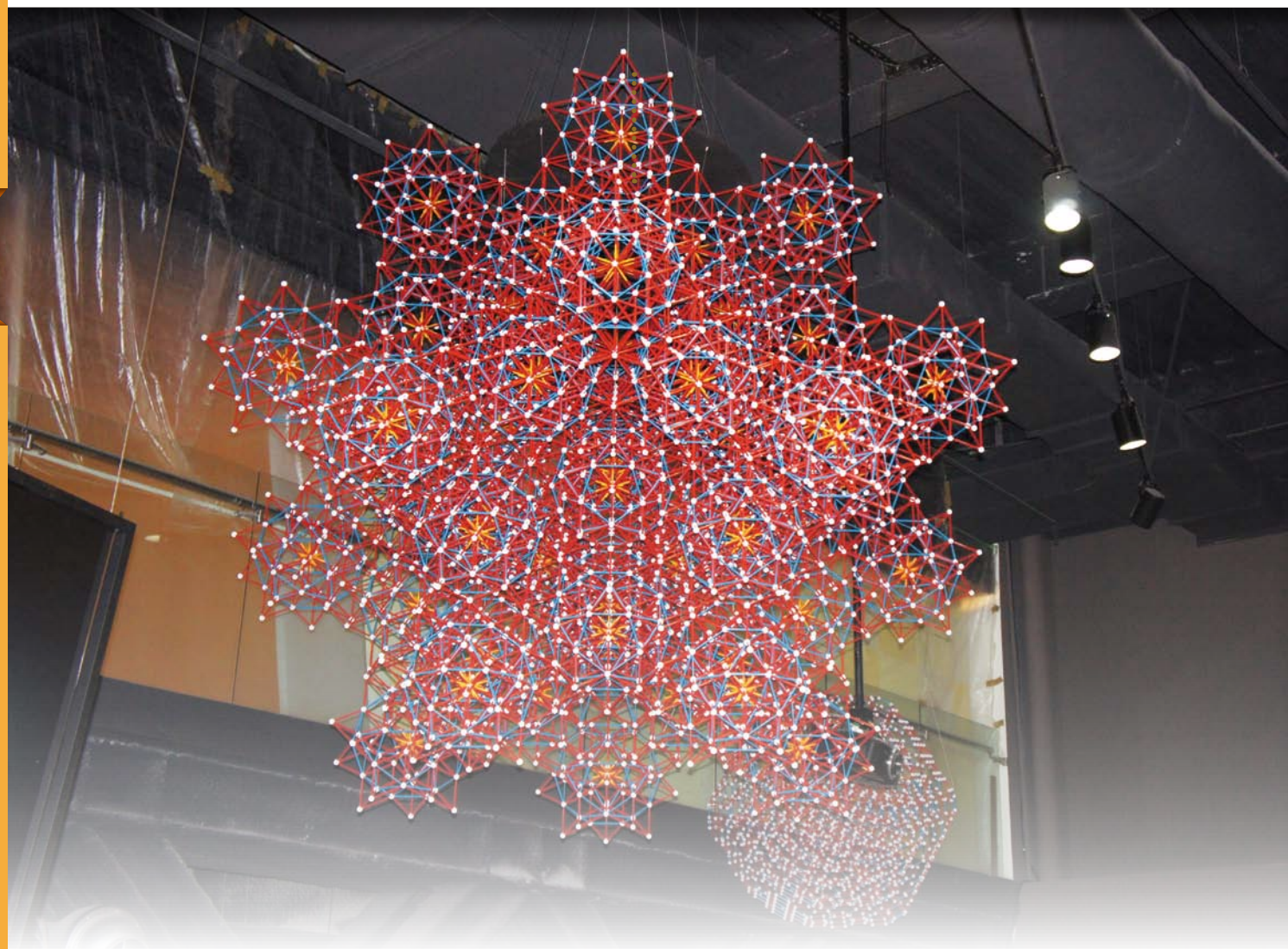


圖 4：二層的菱形六十面體準晶結構，地點：國立臺灣科學教育館。（余筱嵐 攝）

為利用此連結方式，在今年初所製作的 Zometool 超級巴克球。

三、準晶

晶體是一種固體，組成的原子以週期的方式排列成有序的結構；而非晶形的固體則是缺乏長程秩序的不規則固體。在繞射的實驗中，晶體會產生清晰的布拉格繞射亮點，而非晶形固體不會產生這種亮點。從十九世紀開始，科學家就已知道晶體中只能有二重、三重、四重、與六重旋轉對稱，五重旋轉對稱與晶體的週期條件是不

匹配的，這也代表晶體的繞射圖案不會出現五重或是其倍數十重的旋轉對稱。

然而在 1980 年代初，材料科學家丹·謝特曼 (Dan Schechtman) 意外地在快速冷卻鉛錳合金的電子繞射譜中，發現具有十重旋轉對稱的布拉格繞射亮點，證實了存在有一有序但是非週期性，並具有五重或是十重旋轉對稱的 "晶體"，現在通稱此類物質為準晶。事實上，更早幾年英國物理學家羅傑·彭羅斯 (Roger Penrose) 就已發現可以使用一胖一瘦兩種黃金分割菱形，

產生非週期但有序的壁磚圖案，現在稱這種貼壁的方式為彭羅斯貼磚。三維晶體或是準晶可視為一種立體貼磚，晶體是相同單元壁磚週期重複，貼滿整個空間，而準晶可以視為用兩種以上的單元，以非週期方式有序地貼滿整個空間。

一種實現三維準晶的建構方式與二維的準晶類似，使用胖瘦兩種具有黃金分割比例的菱形六面體為建構單元，將整個空間非週期但有序地貼滿。Zometool 模型可以輕易地構建這兩種黃金分割菱形六面體，因此可以應用來製作巨型立體準晶的模型。就像分子有各種各樣的結構與形狀，同樣地，準晶也有無限多的可能性，在國立臺灣科學教育館的準晶模型的建構方法是由范原嘉與柯星宇兩位同學所提出，具體程序如下：以胖菱形六面體為最核心的單元，然後將三十二個胖的菱形六面體建構成凹菱形六十面體，這種多面體有六十二個頂點，再加上位在中心的 Zomeball，整個凹菱形六十面體共含有六十三個 Zomeball。接下來，再將這些凹菱形六十面體視為新的組建單元，或是新的 Zomeball，繼續建構下一個層次的凹菱形六十面體，便得到含有二層的菱形六十面體準晶結構，如圖 4 所示，這個程序與上述的 Sierpinski 巴克球非常類似。因此若以這種多層次非週期有序的角度來看，前面所談的超級巴克球與碳洋蔥球也都可以視為一種準晶結構。

後記：

參與這些模型的設計與製作的同學：莊宸、范原嘉、柯星宇、黃千睿、詹欣穆、張慕傑、郭岷翔、秦逸群、黃泓穎。感謝「科學文創有限公司」余筱嵐女士的許多協助與 Zometool 公司 Paul Hildebrandt 所提供的圖 1 照片。

金必耀 國立臺灣大學化學系教授

