

化學式

沈威宇

2025 年 1 月 14 日

目錄

第一節 化學式 (Chemical formula)	1
一、 實驗式 (Empirical formula) /最簡式/簡式	1
二、 分子式 (Molecular formula)	1
三、 路易斯結構式 (Lewis structure) /路易斯電子點式 (Lewis electron dot formula)	1
四、 路易斯的八隅體規則 (Octet rule)	1
五、 單中心原子分子路易斯電子點式判斷法	1
六、 結構式 (Structural formula)	1
七、 縮合結構式 (Condensed formula)	2
八、 鍵線式/骨架式 (Skeletal formula) /線角結構式 (Line-angle formula) /折線簡式	2
九、 示性式 (Functional group formula) /結構簡式 (Condensed formula)	2
十、 結構圖 (Structural diagram)	2
十一、 球棍模型 (Ball-and-stick model) /球棒模型	2
十二、 空間填充模型 (Space-filling model) /Calotte model/CPK 模型 (CPK model) /Robert Corey - Linus Pauling - Walter Koltun model	2

第一節 化學式 (Chemical formula)

一、 實驗式 (Empirical formula) /最簡式/簡式

是用元素符號表示化合物中各元素的原子個數最簡整數比的化學式。其原子量乘上個數的和稱式量。如 NaCl。

二、 分子式 (Molecular formula)

用元素符號表示一個分子中各元素的原子個數，僅適用於分子化合物。其原子量乘上個數的和稱分子量。為實驗式的整數倍。如 C₆H₁₂O₆。

三、 路易斯結構式 (Lewis structure) /路易斯電子點式 (Lewis electron dot formula)

每個原子在其所在的位置上用不同的元素代號標示。每個鍵結/b.p./bonding pair/共用價電子對/鍵結電子對用畫在原子和原子間的一條線或一對點來表示，l.p./lone pair/未共用價電子對/未鍵結電子對以一對點表示，自由基（不成對的單個電子）以單個點表示，離子以方括號括起來並再其外標示電荷數。

四、 路易斯的八隅體規則 (Octet rule)

除H、He 價電子二個化性最安定外，其餘元素價電子八個化性最安定。路易斯之時尚不知有電子互斥、形式電荷、共振結構等。

五、 單中心原子分子路易斯電子點式判斷法

- 以電負度小者作為中心原子，但 H 除外。
- 將各周圍原子與中心原子以單鍵相連。
- 剩餘電子以 l.p. 填滿周圍原子為八隅體。
- 仍有剩餘電子以 l.p. 填入中心原子。
- 若中心原子不足八隅體，則把周圍原子的 l.p. 變 b.p. (多鍵)，直到中心原子滿足八隅體。
- 例外如：
 - 總價電子數為奇數的分子，如：NO 的 N 與 NO₂ 的 N。
 - 中心原子為 Li, Be, B 等者 (不足八個電子)，如：BF₃、BeCl₂。
 - 中心原子為第三週期 (含) 以後 5A, 6A, 7A 族的化合物 (超過八個電子)，如：PCl₅、SF₆。

六、 結構式 (Structural formula)

在平面上畫出分子結構的拓樸，將路易斯電子點式之共價鍵用線表示鍵數，其餘電子省略。

七、 縮合結構式 (Condensed formula)

省略大部分的鍵線，將各官能基則以簡寫表示與排列。

八、 鍵線式/骨架式 (Skeletal formula) /線角結構式 (Line-angle formula) /折線簡式

在表示有機化合物的立體結構時尤其常用。將結構式的碳改以鍵線的端點與交點表示，並省略接在碳上的氫與碳-氫鍵。

九、 示性式 (Functional group formula) /結構簡式 (Condensed formula)

用來表示有機物分子中所含官能基的簡化結構式，將縮合結構式的所有鍵線均省略。如 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ 。

十、 結構圖 (Structural diagram)

同結構式但將鍵在立體中的出、入紙面分別以 wedge 和 dashed wedge 表示。

十一、 球棍模型 (Ball-and-stick model) /球棒模型

用球表示原子，用棍表示化學鍵，展示分子的三維結構，球的大小代表不同原子種類的相對體積，棍的長度和角度表示鍵長和鍵角，一鍵中棍的數量表鍵數。

十二、 空間填充模型 (Space-filling model) /Calotte model/CPK 模型 (CPK model) /Robert Corey - Linus Pauling - Walter Koltun model

用球表示原子，將原子球緊密相接，展示分子的三維結構，球的大小代表不同原子的相對體積，球相嵌代表共價鍵，相嵌球之中心之距離表示鍵長，兩球與同一球相嵌時兩對相嵌球之中心之連線的夾角表示鍵角。