

求甲烷分子结构中C-H键之间的键角

华南师范大学附属中学 高一（6）班 潘维恒 0623

问题

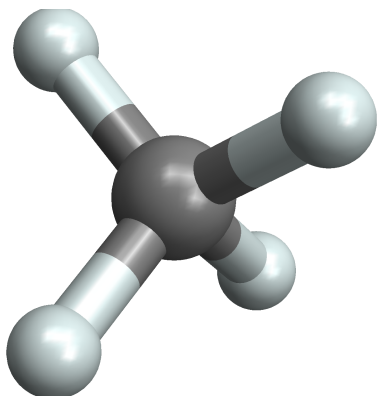
甲烷(CH_4)

甲烷是一种有机物分子，一般状况下为气体，分子式为 CH_4 。

在甲烷的正四面体结构中，四个氢原子位于其四个顶点，碳原子位于正四面体的中心（即其外接球的圆心），则C-H键之间的键角为 $109^\circ 28'$ 。

下图为甲烷的球棍模型。

`ChemicalData["Methane", "MoleculePlot"]`



现在我们来证明，每两个C-H键之间的键角均为 $109^\circ 28'$ 。
也就是求证，正四面体每两条半径之间的夹角为 $109^\circ 28'$ 。

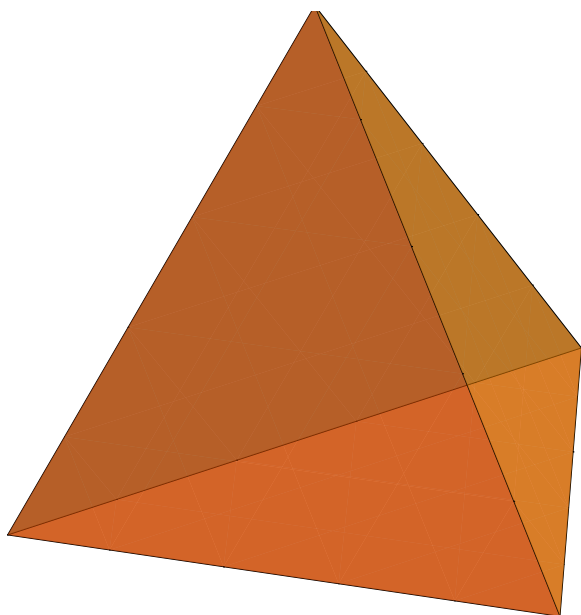
证明

考虑一个空间直角坐标系Oxyz中的正四面体，其各顶点坐标如下：

```
a = {-1, -1, -1}
b = {1, 1, -1}
c = {-1, 1, 1}
d = {1, -1, 1}
o = {0, 0, 0}
```

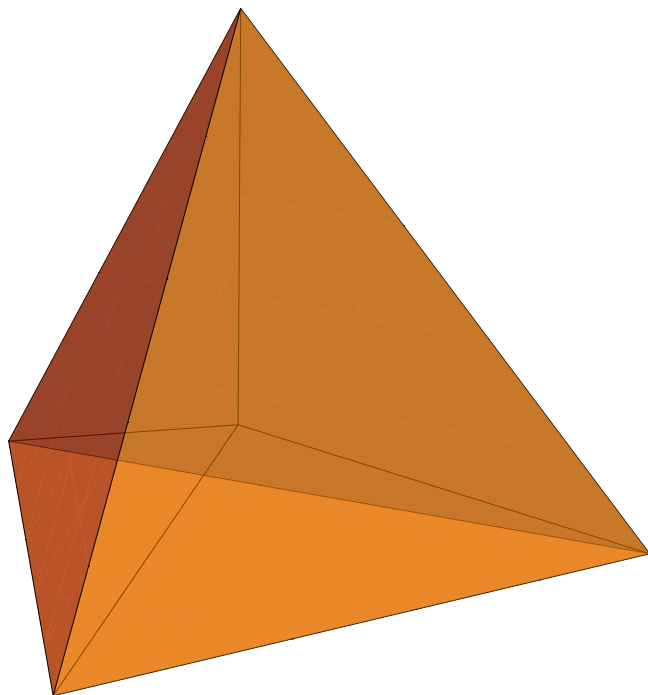
定义正四面体：

```
t = {Orange, Opacity[0.6],
     Simplex[{{-1, -1, -1}, {1, 1, -1}, {-1, 1, 1}, {1, -1, 1}}]}
Graphics3D[t, Boxed -> False, SphericalRegion -> True]
```



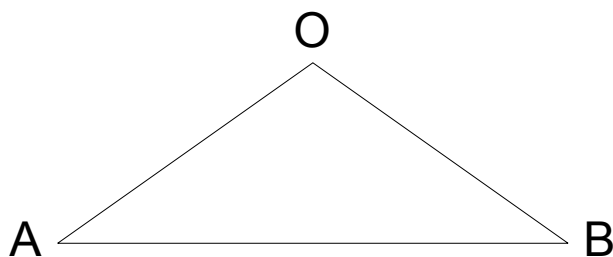
作出其四条半径，即中心到四个顶点的连线：

```
radius = Line[{{o, a}, {o, b}, {o, c}, {o, d}}]
Graphics3D[{t, radius}, Boxed → False, SphericalRegion → True]
```



为了计算两半径之间的夹角，考虑两半径与一条棱围成的三角形：

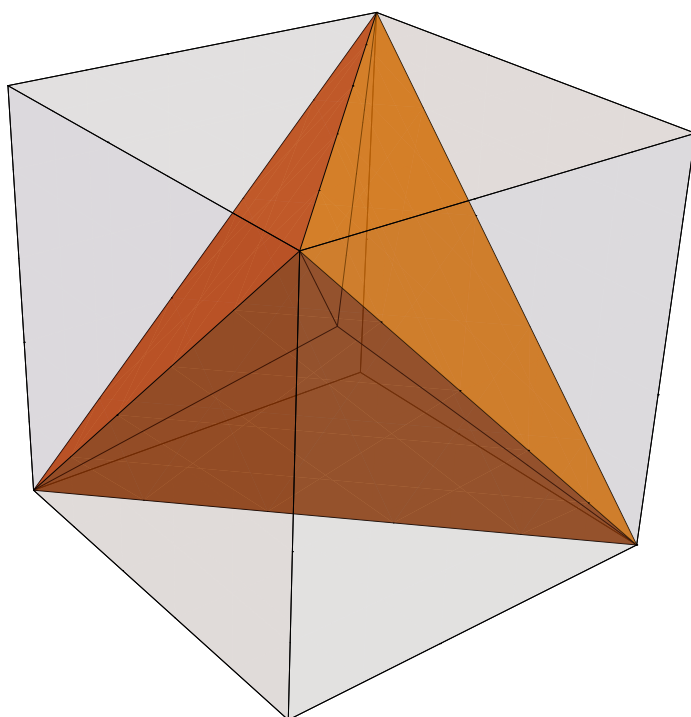
```
Graphics[
  {EdgeForm[Black], FaceForm[White], Polygon[{{-√2, 0}, {√2, 0}, {0, 1}}]}]
```



$\angle AOB$ 即为所求。为了求出 $\angle AOB$ ，需要解 $\triangle AOB$ ，即需要得知这个等腰三角形的三边长。显然，AB的长就是正四面体的棱长，且 $OA=OB$ ，但其长度难以计算。为了求出OA及OB的长度，我们作出正四面体的外接正方体：

```
c = {Gray, Opacity[0.1], Cuboid[{-1, -1, -1}, {1, 1, 1}]}
```

```
Graphics3D[{t, c, radius}, Boxed → False, SphericalRegion → True]
```



设正方体的棱长为 k ，则AB为其面对角线，得 $AB = \sqrt{2} k$ 。

OA与OB的长度为其体对角线的一半，得 $OA=OB = \frac{\sqrt{3}}{2} k$ 。

故 $\angle AOB = 2\arcsin(\sqrt{2}/\sqrt{3}) = 109^\circ 28'$ ， $\angle AOC$ 、 $\angle AOD$ 、 $\angle BOC$ 、 $\angle BOD$ 、 $\angle COD$ 同理，所以正四面体每两条半径之间的夹角为 $109^\circ 28'$ 。证毕。