

재료공학개론 과제1

2018-12432, Electrical and Computer Engineering department, ParkJeonghyun

9/19/2023

1 Problem 1

1.1 1

E_N 을 미분하면 아래와 같다.

$$\frac{dE_N}{dr} = \frac{A}{r^2} - \frac{nB}{r^{n+1}} = 0 \quad (1)$$

평형점에서는 해당 미분값이 0이므로 해당 r_0 라고하자.

1.2 2

$$\frac{A}{r_0^2} - \frac{nB}{r_0^{n+1}} = 0 \quad (2)$$

$$Ar_0^{n-1} = nB \quad (3)$$

$$r_0 = \left(\frac{nB}{A} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (4)$$

1.3 3

r_0 를 E_N 에 대입하면 아래와 같다.

$$E_0 = -\frac{A}{r_0} + \frac{B}{r_0^n} \quad (5)$$

$$= -\left(1 - \frac{1}{n}\right) \frac{A}{r_0} \quad (6)$$

$$= -\left(1 - \frac{1}{n}\right) A \left(\frac{A}{nB} \right)^{\frac{1}{n-1}} \quad (7)$$

2 Problem 2

2.1 1

에너지 곡선을 그리면 Fig.1와 같다.

2.2 2

에너지 곡선에서 최저점을 찾으면 Fig.2와 같다.

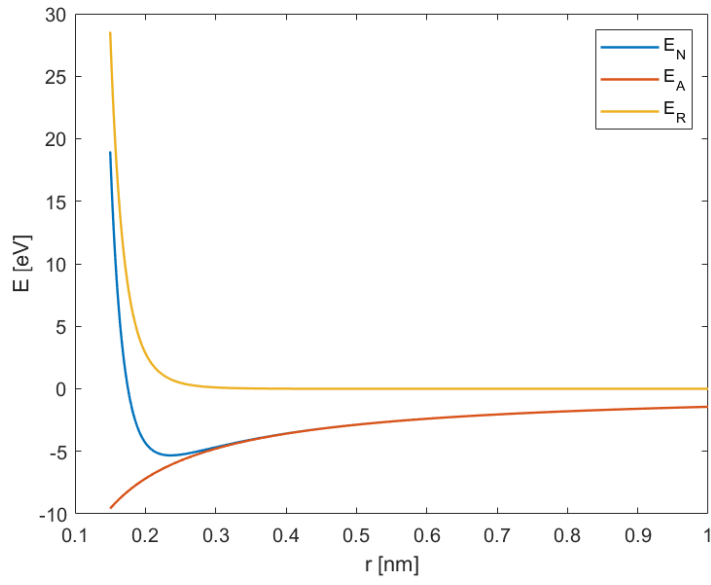


Figure 1: 에너지 그래프

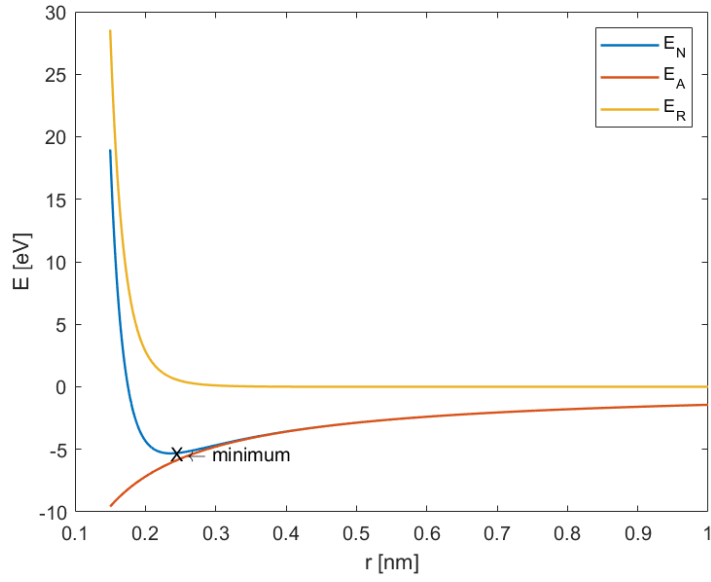


Figure 2: 에너지 그래프

2.3 3

(4) 와 (7)을 이용하여 계산하면 아래와 같다.

$$r_0 = 0.2360nm \quad (8)$$

$$E_0 = -5.3240eV \quad (9)$$

해당 값은 그래프에서 찾은 위치와 일치한다.

3 Problem 3

3.1 1

이온화 정도는 아래의 식과 같다.

$$Ionic = 1 - \exp\left(-\frac{1}{4}|X_A - X_B|^2\right) \quad (10)$$

$$= 1 - \exp\left(-\frac{1}{4}|1.6 - 1.5|^2\right) \quad (11)$$

$$= 0.0025 \quad (12)$$

3.2 2

Ionic character가 0.5보다 충분히 작으므로 공유결합이 주를 이룰 것이다.

4 Problem 4

수소는 전기음성도가 2.20, 플루오린은 3.98, 염소는 3.16의 전기음성도를 가진다. 따라서 HF , HCl 은 모두 permanent한 dipole moment를 가진다. 염소의 크기가 더 커 fluctuating하는 dipole에 의해 발생하는 힘은 더 크지만 HF 의 전기음성도 차이가 더 커 더 큰 permanent dipole을 형성하고 강한 수소 결합을 하게 되므로 HF 의 끓는점이 더 높다.

5 Problem 5

Solid xenon은 비활성 기체의 고체 형태이므로 반데르발스 힘이 주로 작용할 것이다. CaF_2 의 경우 물질을 이루는 원소의 전기음성도 차이가 크므로 Ca^{2+} , F^- 가 이온 결합을 하게 될 것이다. Cu 의 경우 금속 원소에 해당하므로 금속 결합이 주를 이룰 것이다. $CdTe$ 의 경우 각각 1.69, 2.1의 전기음성도를 가지므로 ionic character는 $1 - \exp\left(-\frac{1}{4}|1.69 - 2.1|^2\right) = 4\%$ 에 해당한다. 따라서 공유결합이 주를 이룬다. 고무의 분자식은 $[(CH_2)C_2H(CH_3)(CH_2)]_n$ 으로 탄소와 수소사이의 전기음성도 차이로 인해 분자들간에 수소결합을 이루게 된다. 하지만 원자들 사이에서는 공유결합을 하게 된다. 텅스텐은 금속원소이므로 금속결합을 하게 된다.