|  |
| --- |
| **Exp 6. 분자 모형 결과보고서** |
| |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | **실험일** | **제출함 No.** | **담당교수** | **점수** | | **Apr 06, 2023** |  | **박민진** |  | | **학과** | **학번** | **이름** | | **화학과** | **2023160236** | **정원준** |  1. **Abstract**   화학 결합과 분자의 구조를 규명하는 것은 분자의 성질과 더불어 원자의 성질까지 알아낼 수 있다는 점에서 물리화학에서 중요한 분야이다. 분자의 구조를 규명하기 위해 화학자들은 (molecular) spectroscopy의 방법을 사용했으며, 이를 통해 bond length, chirality, polarization 등 여러 정보들을 얻었다. 나아가 XRD를 통해 molecule 이외의 solid와 lattice에 대해서도 물성을 규명했다. 하지만 spectroscopy의 결과는 고전적인 해석과 상당 부분 일치하지 않았으며, 일련의 결과를 설명하기 위한 새로운 이론들이 요구됐다.  본 탐구에서는 일련의 결과를 해석하기 위해 제시된 모델인 VBT, VSEPR 등 여러 이론들의 시사점을 rigid sphere model을 통해 확인하였다. 우선 ball and stick model 키트를 통해 잘 알려진 여러 분자들을 조립하며 VBT와 VSEPR 모델에 입각한 분자의 구조와 결합각을 확인했다. 이를 위해 3차원에서 원자 간의 연결 관계, shared electron pair와 lone pair의 위치를 시각화했다. 나아가 CH4를 기준으로 중심 원자인 탄소에서 전자 촉진이 일어나 hybridized orbital을 형성했을 때와 그렇지 않았을 때의 bonding angle을 비교하여 단순한 분자에서 VBT의 타당성을 확인했다. 또한 Bravais lattice에서 cubic에 속하는 fcc, bcc structure의 unit cell을 구성하였다. 이 과정에서 lattice에서 unit cell을 취하는 방법에 따라 unit cell의 모양이 소폭 달라질 수 있지만, 동일한 구조의 lattice에서 얻은 unit cell에 속하는 입자 수는 unit cell을 얻는 방법과 무관함을 확인했다. |

|  |
| --- |
| **Exp 6. 분자 모형 결과보고서** |
| 1. **~ III. Data & Results**  * **실험 A. 분자 모형 만들기 ※ There is one example. Refer to it**  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | |  | **입체수** | **결합 전자쌍** | **고립 전자쌍**  **(중심 원자)** | **전자쌍 배열1** | **분자의 기하 구조2** | **결합각** | **분자모형**  **[사진첨부]** | **극성여부** | **또 다른 예** | | **BeH2** | **2** | **2** | **0** | **Linear** | BeH2 Lewis Structure, Molecular Geometry, Hybridization, and Polarity -  Techiescientist  **Linear** | 180 o |  | Non  polar | BeCl2,  BeF2 | | **BH3** | **3** | **3** | **0** | **Trigonal**  **planar** | Is BH3 Polar or Nonpolar? - Techiescientist  **Triagonal**  **Planar** | 120 o |  | Non  polar | BF3, BCl3 | | **CH4** | **4** | **4** | **0** | **Tetrahedral** | What is the chemical formula of methane? | Socratic  **Tetrahedral** | 109.5 o |  | Non  polar | CCl4,  CBr4 | | **NH3** | **4** | **3** | **1** | **Tetrahedral** | Trigonal pyramidal | 107o |  | polar | PF3, XeO3 | | **H2O** | **4** | **2** | **2** | **Tetrahedral** | **Bent** | 104.5 o |  | Polar | H2S, H2Se | | **PCl5** | **5** | **5** | **0** | **Triagonal**  **Bipyramidal** | PCl5 Geometry and Hybridization - Chemistry Steps  **Triagonal**  **Bipyramidal** | 90 o  120 o |  | Non  polar | PF5, PBr5 | | **SeF6** | **6** | **6** | **0** | **Octahedral** | Hexafluorure de sélénium — Wikipédia  **Octahedral** | 90 o |  | Non  polar | TeF6, SeCl6 | | **XeF4** | **6** | **4** | **2** | **Octahedral** | Which is the right structure of XeF4 ?  **Square**  **Planar** | 90° |  | Non  polar | KrF4 | |

|  |
| --- |
| **Exp 6. 분자 모형 결과보고서** |
| * **실험 A. 분자 모형 만들기**  |  |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | --- | |  | **이름** | **Structural formula** | **분자 모형**  **[Picture]** | **극성 여부** | | **C2H6** | ethane |  |  | nonpolar | | **C2H4** | Ethene | ethene - Wiktionary |  | Nonpolar | | **C2H2** | ethyne |  |  | Nonpolar | | ***cis*-C2H2Cl** | *cis*-1,2-dichloroethene |  |  | Polar | | ***trans*-C2H2Cl** | *trans*-1,2-dichloroethene |  |  | Nonpolar | | **CO2** | Carbon Dioxide |  |  | Nonpolar | | **CH3OH** | methanol | 메탄올 독성 - 위키백과, 우리 모두의 백과사전 |  | Polar | | **CH3COOH** | acetic acid |  |  | Polar | |

|  |
| --- |
| **Exp 6. 분자 모형 결과보고서** |
| * **실험 A. 분자 모형 만들기**  |  |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | --- | | **화학식** | **이름** | **Structural formula** | **분자 모형**  **[Picture]** | **극성 여부** | | **HCHO** | formaldehyde | formaldehyde - Wiktionary |  | Polar | | **CH3CN** | Acetonitrile |  |  | Polar | | **C6H6** | Benzene | What is Benzene? - REGENESIS Remediation Solutions |  | Nonpolar | | **N2** | Nitrogen | How To Calculate Bond Order? | 원소 질소 (n2), 분자 모델. 질소 가스는 지구 대기의 주성분이다. 질소 (파란색) : 원자는 기존의 컬러 코딩 분야로 표시됩니다  로열티 무료 사진, 그림, 이미지 그리고 스톡포토그래피. Image 18502392.  뒤에 가려진 결합이 하나 더 있다. | Nonpolar |  * **실험 B. 격자 모형 만들기**  |  |  |  | | --- | --- | --- | |  | **체심 입방 단위 세포(bcc)** | **면심 입방 단위 세포(fcc)** | | **모형**  **[Picture]** |  |  | | **단위 세포 내에 있는 원자의 알짜 개수** | **2** | **4** |   **※ 알짜 개수 계산 과정 기록**  Unit cell 안의 입자 수는 다음과 같이 구할 수 있다. Bravais lattice 안에서 cubic을 간주하면,  이때 세는 particle의 수는 위치하는 핵의 수를 센다고 간주할 수 있다.   1. bcc structure의 unit cell에서는 체심에 입자 1개, 꼭짓점에 입자가 8개 있으므로   이는 unit cell의 배열을 뒤집어서 생각해도 계산에 큰 변화가 없다.   1. fcc structure의 unit cell에서는 면심에 입자 6개, 꼭짓점에 입자가 8개 있으므로 |

|  |
| --- |
| **실험6. 분자 모형 결과보고서** |
| 오른쪽 그림을 활용해도 결과에 차이가 없다. 오른쪽 그림에서는 unit cell의 모서리에 입자가 12개, 체심에 입자가 1개 있으므로  **IV. Calculation & Analysis**  두 물질 A, B의 화학식은 동일하지만 물리/화학적 성질이 다를 때 두 물질이 이성질체(isomer) 관계에 있다고 한다. 이성질체에는 구조 이성질체(structural isomer)와 입체 이성질체(stereoisomer)가 있다.  원자 간의 연결 관계가 다른 이성질체를 구조 이성질체(structural isomer)라고 한다. 구조 이성질체 관계에 속하는 두 물질은 특정 원자에 다른 작용기가 결합되어 있다. 즉, 치환기의 종류와 위치가 달라지게 된다. 예를 들어 n-butane은 CH3CH2CH2CH3의 구조를 갖지만 iso-뷰테인의 경우 CH3CH(CH2)CH3의 구조를 갖는다.  원자 간의 연결 관계는 같지만 결합의 기하적인 위치가 다른 이성질체를 입체 이성질체(stereoisomer)라고 한다. 입체 이성질체에는 부분입체이성질체(diastereomer)와 광학이성질체(enantiomer, optical isomer)가 있다. 광학 이성질체는 어떤 분자와 그 분자의 거울상이 서로 겹쳐지지 않을 때 원상과 거울상의 관계를 의미한다. 따라서 광학 이성질체는 chirality를 나타내며, chiral center을 갖는다. 부분입체이성질체란 입체 이성질체 중 achiral을 의미한다. 부분입체이성질체에는 기하 이성질체(geometrical isomer)와 형태 이성질체(conformational isomer)가 속한다. 기하 이성질체란 분자 안에서 특정 작용기의 방향에 따라 발생하는 이성질체를 의미한다. 기하 이성질체는 대개 이중결합을 중심으로 발생하며, 작용기가 같은 방향으로 있는 것을 *cis*-isomer, 반대 방향으로 있는 것을 *trans*-isomer라고 한다. 형태 이성질체는 회전이 가능한 단일 결합을 중심으로 작용기가 회전하여 여러 구조가 가능한 경우를 지칭한다. 예를 들어 ethane의 경우 staggered conformation과 eclipsed conformation을 가지며, staggered conformation이 더욱 안정한 형태이다.  부분입체 이성질체의 다른 예시로는 anomer와 epimer가 있다. Epimer란 1개의 chiral center를 중심으로 작용기의 위치가 대칭되는 경우를 의미한다. 이는 보통 linear sugar에서 활용되며, carbonyl기의 탄소를 기준으로 가장 먼 거리에 있는 탄소를 보통 따진다. Anomer 또한 epimer와 유사하게 1개의 anomeric center를 기준으로 작용기의 배열이 반대가 되는 쌍을 의미한다. Anomer는 보통 cyclic sugar에서 자주 관찰된다.  **V. Discussion**  **1. 원자 간 결합은 극성 결합일지라도 분자는 비극성인 경우가 있다. 이를 예를 들어 설명하여라. (수업시간에 설명한 분자는 제외)**  결합의 극성과 분자의 극성은 혼동하기 쉬운 개념이다. 결합의 극성은 결합에 참여하는 두 원소의 electronegativity 차이가 존재할 때 발생한다. Electronegativity는 원소의 고유한 성질로 간주할 수 있으므로 대부분의 경우 nonpolar covalent bond는 결합에 참여하는 두 원소가 동일할 때 발생한다. 반면, nonpolar molecule은 2가지 경우가 존재한다. 먼저, 분자 내 존재하는 모든 결합이 nonpolar covalent bond인 경우가 있다. O2, H2 등 우리가 알고 있는 homonuclear diatomic molecule이 이 경우에 해당한다. 또한, 분자 내 polar covalent bond가 존재하더라도 분자 내 존재하는 모든 결합의 dipole moment의 합이 인 경우 nonpolar molecule이 된다. 예를 들어 CS2의 경우 C-S 결합은 극성을 갖는 이중 결합이지만, 2개의 C-S 결합에서의 dipole moment는 크기만 같고 방향이 반대이기에 벡터를 모두 합하면 이 된다.  이처럼 nonpolar molecule의 구조는 일련의 symmetry를 가진다. Nonpolar molecule의 상당수가 C2v, Th, Oh 등 많은 symmetrical element를 갖는 point group에 속한다3. 이들 point group에 속하기 위해서는 identity element 이외에 sigma plane, rotation axis 등 여러 element를 가져야 하기에 결합이 equivalence(중심 원자가 비공유 전자쌍 없이 같은 원소와 결합)를 갖는 경우가 대부분이다. 예를 들어 BeF2, CF4, XeF6의 경우 원소와 Fluorine 사이에 polar covalent bond를 갖지만, 분자가 sigma plane, rotation axes 등 다양한 symmetry element를 갖기에 Fluorine은 center atom에 대해 모두 동등한(equivalent) 위치[[1]](#endnote-1)에 존재한다. 따라서 이들 결합의 dipole moment의 합은 3D symmetry를 갖는 vector의 합이므로 가 된다.  **2. 탄소 원자가 혼성화 하지 않고 p-오비탈이 다른 오비탈과 결합한다고 가정하면 탄소의 결합각은 얼마가 되겠는가? 그 이유는 무엇인가?**  기존의 hybridization model에서 1개의 s orbital과 3개의 p orbital이 hybridization을 통해서 4개의 동등한 sp3 orbital을 형성한다. 이때 4개의 hybridized orbital은 동등한 위치와 에너지를 가지며, 따라서 tetrahedral 형태를 갖도록 위치한다. 이로 인해 tetrahedral structure의 molecule에서는 대략 109.5o의 bonding angle이 관측된다. 반면 탄소의 valence shell의 p orbital이 다른 atom의 s orbital이나 p orbital 등과 overlap된다고 가정하자. 다시 말하자면 2s orbital의 electron의 promotion이 일어나지 않고, valence electron 중 2p orbital이 overlap에 참여할 때, (orbital의 overlap은 linear하게 일어난다고 가정하면) carbon의 bonding angle은 p-orbital의 angle과 동일하다. 따라서 약 90o의 bonding angle을 가지게 된다.  파동함수 관점에서 sigma bond는 동일한 방식으로 형성된다고 가정하자. 가장 간단하게 탄소 원자 1개의 수소화물을 예로 들면4,  (: normalization constant)  이때 탄소 원자의 2p orbital은 서로 orthogonal하며, 수소 원자의 1s orbital은 결합한 p orbital을 제외한 탄소의 p orbital 또는 다른 수소의 1s orbital과 상호작용하지 않음은 자명하다(overlap integral(S)=0, orthogonality). 따라서 3개의 p orbital과 수소의 1s orbital로 구축된 3개의 sigma bond의 wavefunction은 서로 orthogonal( )하며, 2p orbital과 같이 90o의 bonding angle을 가지게 된다.[[2]](#endnote-2)  **VII. Reference**   * + - 1. *Image* Source: Zumdahl, Chemistry, 10/ed., Cengage, 2018, pp342-344       2. *Image Source*: Wikimedia Foundation       3. Weller, Inorganic chemistry, 7/ed., Oxford, 2018, pp62-76       4. Atkins, Physical chemistry, 11/ed., Oxford, 2018, pp344-381 |

1. Identical apart from their orientation in space (Physical Chemistry(11/ed.), Atkins) [↑](#endnote-ref-1)
2. Hybridized orbital들은 절대 orthogonal할 수 없다는 일각의 주장도 있으나 hybridized orbital로부터 형성된 equivalent bond로 인한 bond orbital들은 서로 orthogonal하다는 conventional theory를 인용함. [↑](#endnote-ref-2)