

삼불화붕소-아니솔착화합물의 구조와 결합특성

김 승 철

경애하는 최고령도자 김정은동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《수학, 물리학, 화학, 생물학과 같은 기초과학부문에서 과학기술발전의 원리적, 방법론적기초를 다져나가면서 세계적인 연구성과들을 내놓아야 합니다.》(《조선로동당 제7차대회에서 한 중앙위원회사업총화보고》 단행본 40페이지)

삼불화붕소(BF_3)와 다른 물질들(디에틸에테르, 디메틸에테르, 메틸알콜, 페놀 등)사이에 형성되는 착화합물에 대한 이론적 및 실험적연구들[1-3]은 많이 진행되었으나 BF_3 과 아니솔($\text{C}_6\text{H}_5\text{OCH}_3$)사이에 형성되는 착화합물에 대한 연구자료는 적다.

우리는 BF_3 과 아니솔사이에 형성될수 있는 착화합물들의 안정화에너지를 계산하고 가장 안정한 착화합물의 구조와 결합특성을 고찰하였다.

계 산 방 법

BF_3 이 아니솔에서 에테르기의 산소원자 및 벤졸고리의 수소원자와 호상작용한다는 것은 이미 알려져있다. 이 호상작용들에 의하여 형성될수 있는 착화합물들의 구조에 대한 모형화와 방온도($T=293.15\text{K}$)에서의 생성열 및 결합차수계산은 계산화학프로그램 Hyperchem 8.0에서의 반경험적분자궤도법인 PM3법으로 하였다.

결과 및 해석

BOA모형 이 모형에서는 BF_3 의 붕소원자가 아니솔에서 에테르기의 산소원자와 호상작용하여 착화합물을 형성하며(그림 1) 이때 생성열은 $\Delta H(\text{BOA}) = -1\,233.027\text{kJ/mol}$ 이다. 그런데 아니솔(그림 2)과 BF_3 (그림 3)의 생성열은 각각 $\Delta H(\text{A}) = -61.521\text{kJ/mol}$, $\Delta H(\text{B}) = -1\,146.508\text{kJ/mol}$ 이므로 이 착화합물의 안정화에너지는 다음과 같다.

$$\Delta E = \Delta H(\text{BOA}) - (\Delta H(\text{A}) + \Delta H(\text{B})) = -24.998\text{kJ/mol}$$

BHA모형 이 모형에서는 BF_3 의 붕소원자가 아니솔에서 벤졸고리의 수소원자와 결합

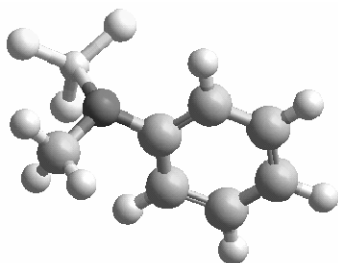


그림 1. BOA모형

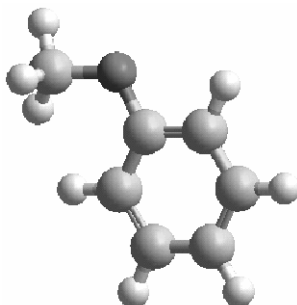


그림 2. 아니솔분자의 구조모형

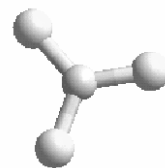


그림 3. BF_3 분자의 구조모형

하여 착화합물을 형성하며(그림 4) 이때 생성열은 $\Delta H(\text{BHA}) = -1\,200.002\text{kJ/mol}$ 이다. 그러므로 이 착화합물의 안정화에너지는 다음과 같다.

$$\Delta E = \Delta H(\text{BHA}) - (\Delta H(\text{A}) + \Delta H(\text{B})) = 8.027\text{kJ/mol}$$

BAB모형 이 모형에서는 2개의 BF_3 분자에서 붕소원자들이 각각 아니솔에서 에테르기의 산소원자, 벤зол고리의 수소원자와 결합하여 착화합물을 형성한다.(그림 5) 이때 생성열은 $\Delta H(\text{BAB}) = -2\,373.486\text{kJ/mol}$ 이므로 이 착화합물의 안정화에너지는 다음과 같다.

$$\Delta E = \Delta H(\text{BAB}) - (\Delta H(\text{A}) + 2\Delta H(\text{B})) = -18.949\text{kJ/mol}$$

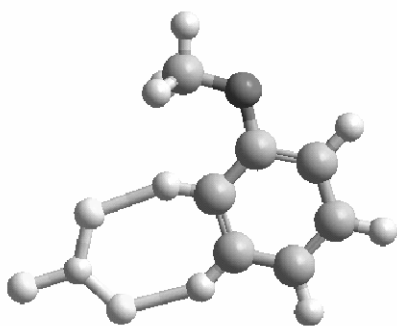


그림 4. BHA모형

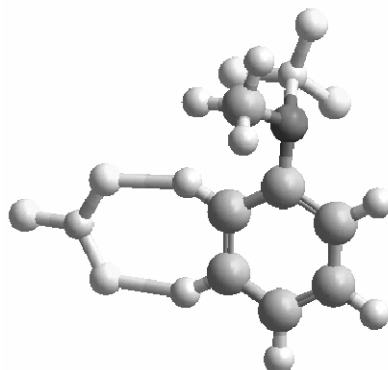


그림 5. BAB모형

표. BF_3 -아니솔착화합물의 안정화에너지
계산결과($T = 293.15\text{K}$)

구조모형	$\Delta E / (\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$	
	계산결과	선행연구자료
BOA	-24.998	-23.94
BHA	8.027	-1.26
BAB	-18.949	-18.56

우의 계산결과들은 선행연구자료[4]와 비교적 잘 일치된다.(표)

계산결과들로부터 BOA모형에 해당하는 착화합물이 가장 안정하며 BHA모형에 해당하는 착화합물은 매우 불안정하다는것을 알수 있다.

한편 BOA모형에 해당하는 착화합물에서 붕소원자와 산소원자사이의 결합차수는 0.405로서 배위결합에 해당된다.(그림 6)

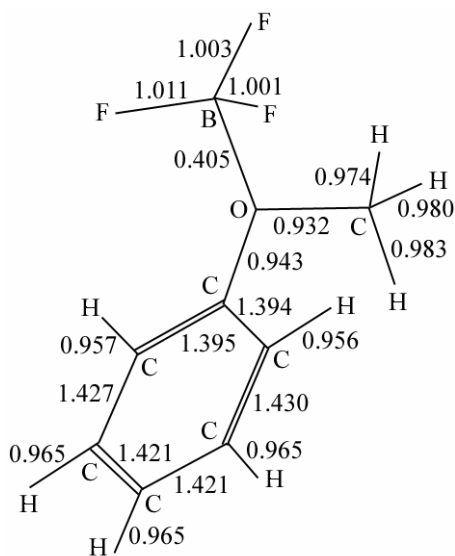


그림 6. BOA모형에서의 결합차수

맺는 말

삼불화붕소와 아니솔은 방온도에서 붕소원자와 산소원자사이에 배위결합을 이루면서 1:1의 물질량비로 결합될 때 가장 안정한 착화합물을 형성한다. 이 착화합물의 안정화에너지는 -24.998kJ/mol 이며 붕소원자와 산소원자사이의 배위결합차수는 0.405이다.

참 고 문 헌

- [1] Tao Lin et al.; J. Phys. Chem., A 113, 7267, 2009.
- [2] A. A. Palko et al.; J. Chem. Phys., 28, 214, 1958.
- [3] S. G. Katalnikov; Separation Science and Technology, 36, 8-9, 1737, 2001.
- [4] Peng Bai et al.; Annals of Nuclear Energy, 92, 16, 2016.

주제 108(2019)년 1월 5일 원고접수

Structure and Bonding Characteristic of Boron Trifluoride-Anisole Complex

Kim Sung Chol

Boron trifluoride and anisole form the stablest complex when their molar ratio is 1 : 1 at the room temperature. The stabilization energy of this complex is -24.998kJ/mol and the order of coordinate bond between boron atom and oxygen atom is 0.405.

Key words: boron trifluoride, anisole