

Chapter 2. Atomic Structure & Interatomic Bonding

화학원소의 특징 ~ # of protons (양성자 수)

or atomic number (Z) (원자번호)에 의해 결정

Naturally occurring elements: 1 ~ 92

(H) (U)

Atomic mass (A) - mass of protons & neutrons within the nucleus

동일 원소에서 양성자 수는 같지만 중성자 수(N)는 다를 수 있음

→ isotopes (동위원소)

$$A \cong Z + N$$

Atomic weight of iron (Fe) = 55.85 amu/atom

= 55.85 g/mol

Electrons in Atoms

Atomic models

- **Bohr model:** orbitals로 설명
→ 불연속 궤도를 움직이는 입자로 취급

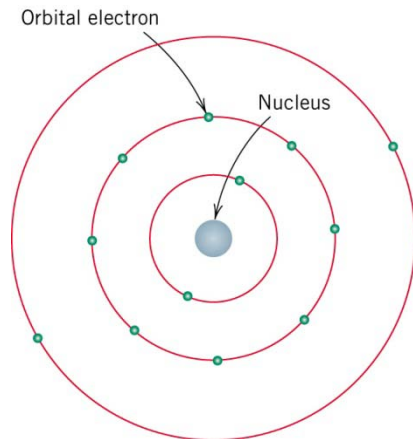


Fig. 2.1 Bohr atom의 모형

- **Wave-mechanical model:** 확률분포함수 or 전자구름으로 설명
→ 전자는 핵 주위의 다양한 위치에 존재 (확률분포로 인식)

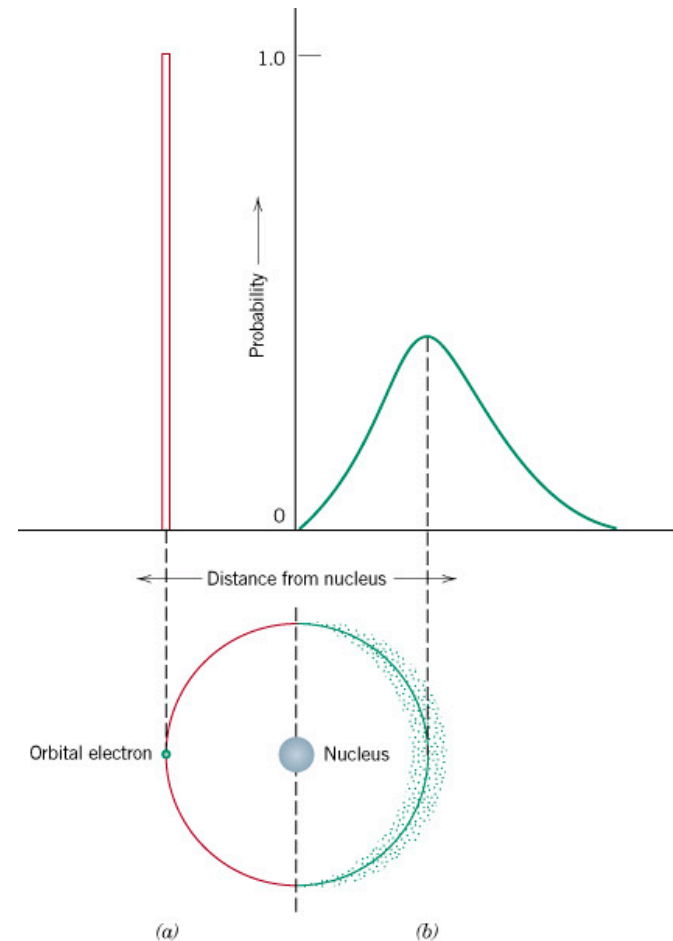


Fig. 2.3 전자분포의 비교
(a) Bohr model
(b) Wave-mechanical model.

Electron configuration (전자배치)

Table 2.1 The Number of Available Electron States in Some of the Electron Shells and Subshells

Principal Quantum Number n	Shell Designation	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
				Per Subshell	Per Shell
1	<i>K</i>	<i>s</i>	1	2	2
2	<i>L</i>	<i>s</i>	1	2	8
		<i>p</i>	3	6	
3	<i>M</i>	<i>s</i>	1	2	18
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
4	<i>N</i>	<i>s</i>	1	2	32
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	

주양자 수
(주껍질)

부껍질

부껍질당
전자수

주껍질당
전자수

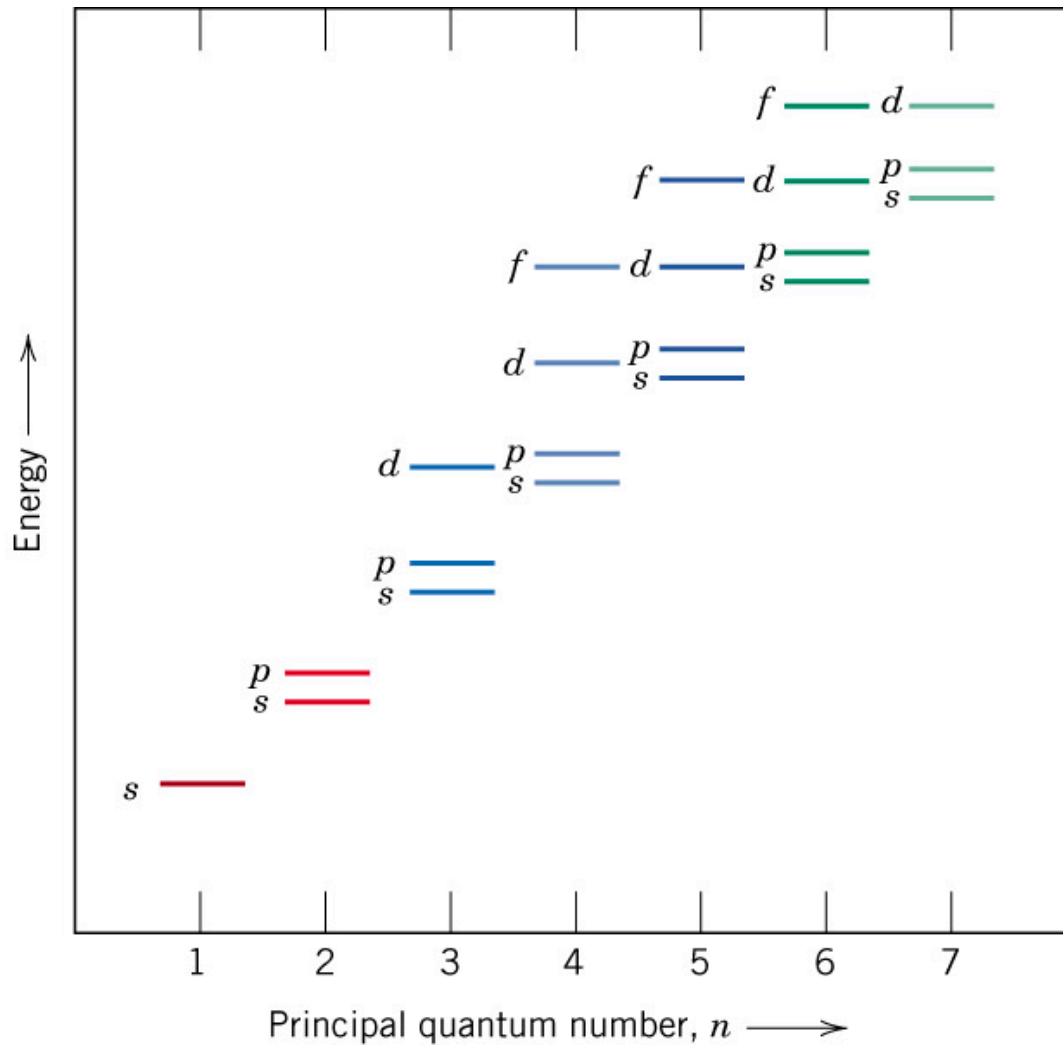


Fig. 2.4 주껍질과 부껍질에 대한 전자들의 상대적인 에너지 준위.

Table 2.2 A Listing of the Expected Electron Configurations for Some of the Common Elements^a

Element	Symbol	Atomic Number	Electron Configuration
Hydrogen	H	1	1s ¹
Helium	He	2	1s ²
Lithium	Li	3	1s ² 2s ¹
Beryllium	Be	4	1s ² 2s ²
Boron	B	5	1s ² 2s ² 2p ¹
Carbon	C	6	1s ² 2s ² 2p ²
Nitrogen	N	7	1s ² 2s ² 2p ³
Oxygen	O	8	1s ² 2s ² 2p ⁴
Fluorine	F	9	1s ² 2s ² 2p ⁵
Neon	Ne	10	1s ² 2s ² 2p ⁶
Sodium	Na	11	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹
Magnesium	Mg	12	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²
Aluminum	Al	13	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ¹
Silicon	Si	14	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ²
Phosphorus	P	15	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ³
Sulfur	S	16	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁴
Chlorine	Cl	17	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁵
Argon	Ar	18	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶
Potassium	K	19	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹
Calcium	Ca	20	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²
Scandium	Sc	21	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹ 4s ²
Titanium	Ti	22	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ² 4s ²
Vanadium	V	23	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ³ 4s ²
Chromium	Cr	24	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁵ 4s ¹
Manganese	Mn	25	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁵ 4s ²
Iron	Fe	26	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁶ 4s ²
Cobalt	Co	27	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁷ 4s ²
Nickel	Ni	28	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ⁸ 4s ²
Copper	Cu	29	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹
Zinc	Zn	30	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ²
Gallium	Ga	31	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
Germanium	Ge	32	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
Arsenic	As	33	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
Selenium	Se	34	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴
Bromine	Br	35	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵
Krypton	Kr	36	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶

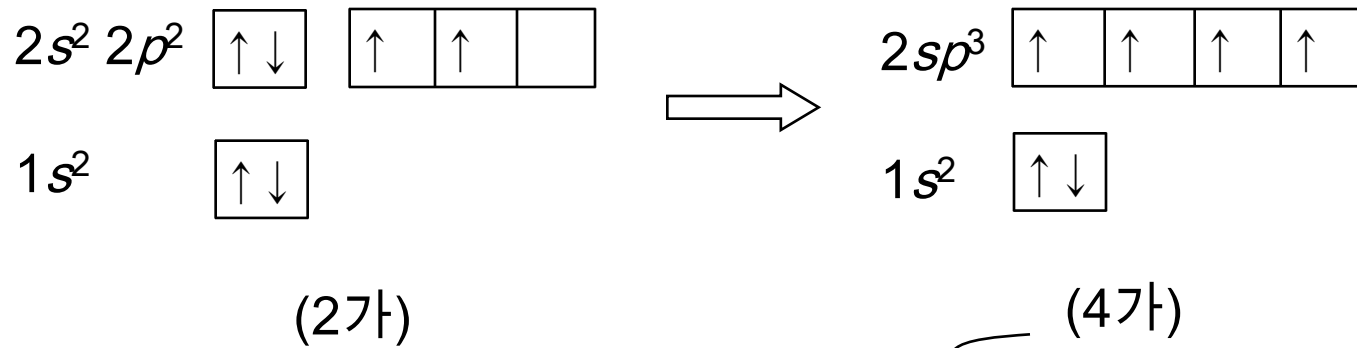
^a When some elements covalently bond, they form *sp* hybrid bonds. This is especially true for C, Si, and Ge.

최외각 전자(원자가 전자)가 완전히 차지 않은 원소는 전자를 잃거나 얻어 안정적인 원자 배열을 함.

cf.) Hybrid orbitals (혼성 궤도함수)

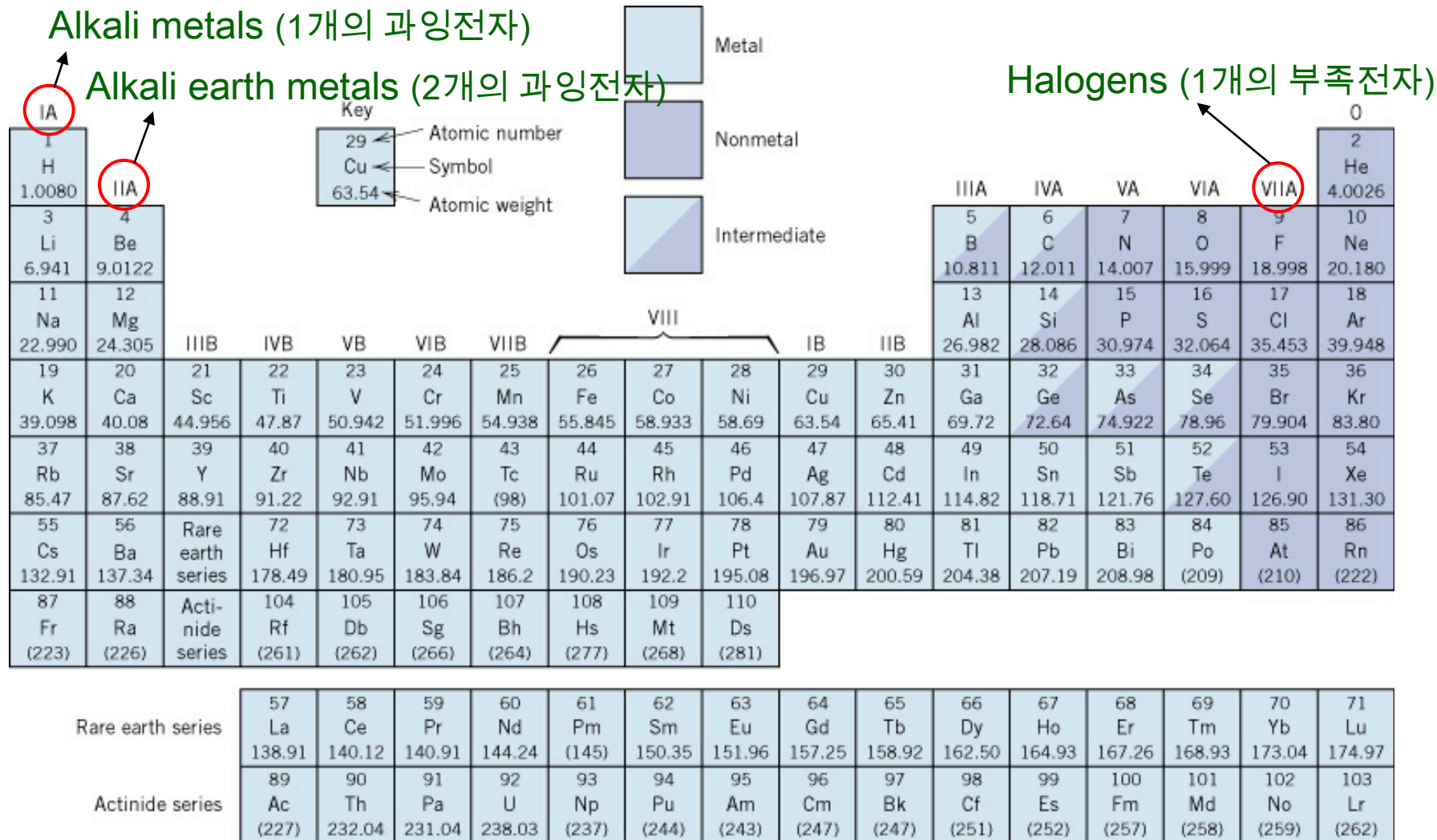
sp , sp^2 , sp^3 hybrids

예) C



유기화학에서
중요한 역할을 함.

Periodic Table (Fig. 2.6)



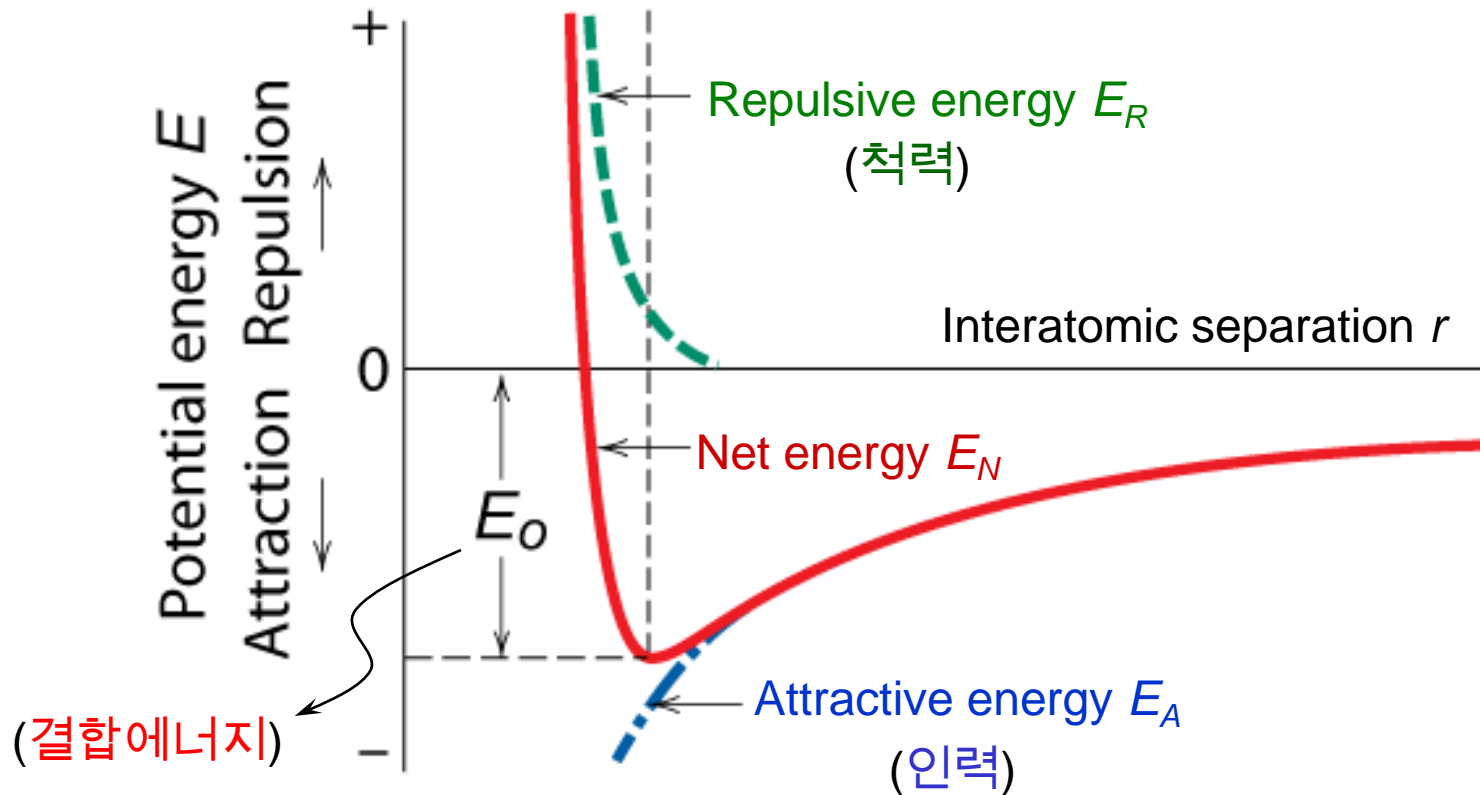


Fig. 2.8(b) 고립된 두 원자의 원자간 거리에 대한 알짜에너지 변화:
 $(E_N = E_A + E_R)$.

Primary Interatomic Bonds

Ionic bonding (이온결합)

Metallic elements & Nonmetallic elements



→ Ceramics에서의 주된 결합

특징: Nondirectional (비방향성)

결합 E ↑, 녹는점 ↑

hard, brittle

열전도성 ↓, 전기전도성 ↓

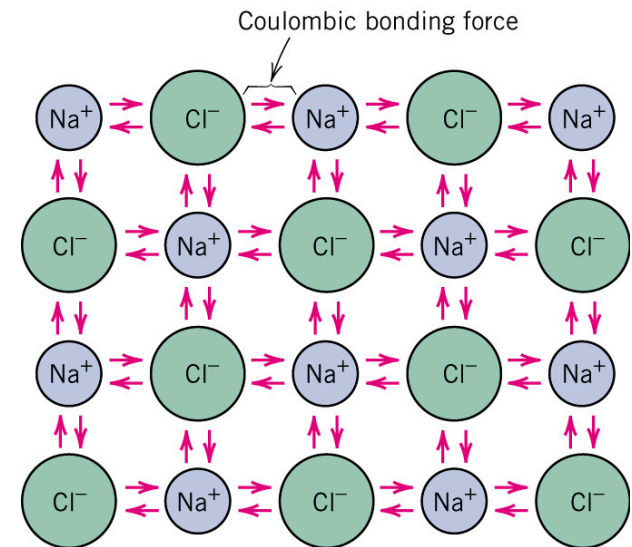


Fig. 2.9 NaCl의 이온결합.

Covalent bonding (공유결합)

인접한 원자와의 전자공유

비금속 원소로 구성된 분자
(H_2 , O_2 , Cl_2 , HNO_3 , ...)

준금속 원소로 구성된 분자
(Si, Ge, SiC, ...)

금속+준금속 원소로 구성된 분자
(GaAs, InSb, ...)

특징: Directional (방향성)
녹는점 범위 다양
→ Polymer, 반도체 등

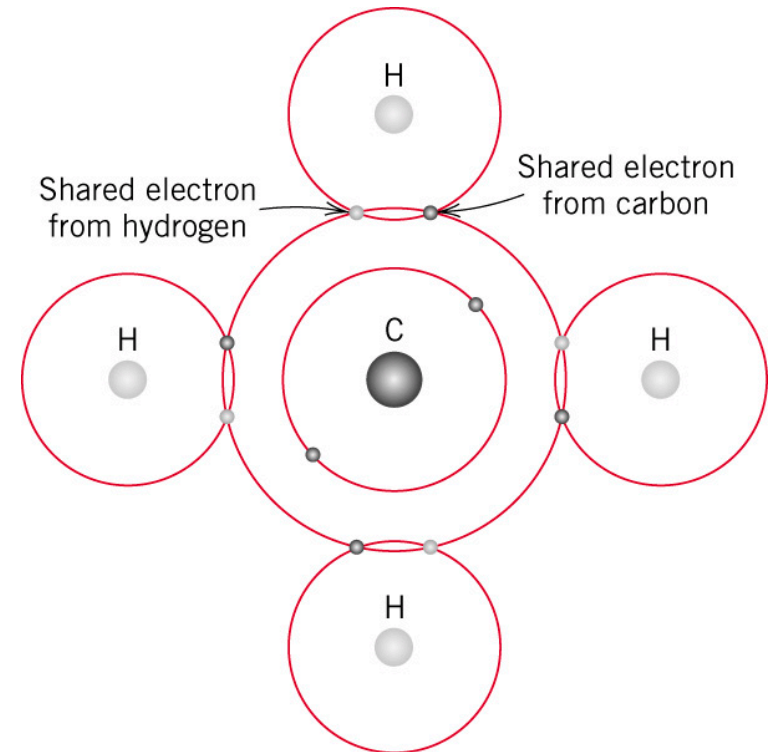


Fig. 2.10 메탄의 공유결합.

- 화합물의 ionic bonding과 covalent bonding은 정도의 차이
 - 원소 A와 B간 결합의 이온 특성

% ionic character (이온특성 백분율)
 $= \{1 - \exp(-0.25(X_A - X_B)^2)\} \times 100$



원소 A, B 각각의 전기음성도

ex.) NaCl 의 이온특성 백분율 ?

0.9 3.0

∴ % ionic character = 66.8%

Metallic bonding (금속결합)

전자는 전체 금속에 자유롭게 존재 가능

“Sea of electrons”
or “Electron cloud”

→ Metals or Metallic alloys의
주된 결합

특징: Non-directional (비방향성)
결합 E, 녹는점 범위 다양
열, 전기 전도성 ↑

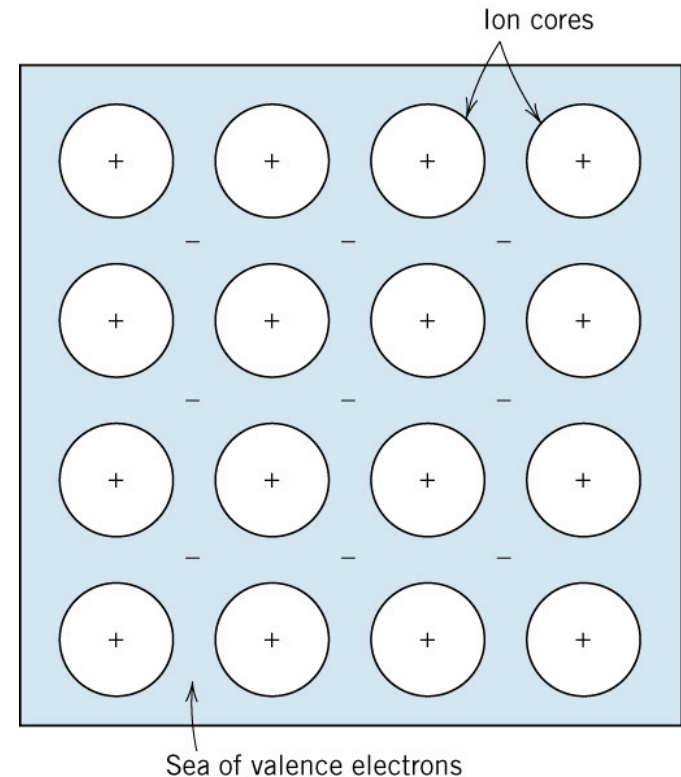


Fig. 2.11 금속결합의 개략도.

Secondary Bonding or van der Waals Bonding

: 1차 결합에 비해 결합 $E \downarrow$

모든 원자나 분자 사이의 결합에 존재

2차 결합은 분자나 원자의 **dipoles** (쌍극자)에 기인

Dipole bonds (쌍극자 결합)의 종류

- **Fluctuating induced dipole bonds**

전기적 대칭인 원자나 분자에서 생김
대칭구조를 왜곡시킴, 일시적 쌍극자

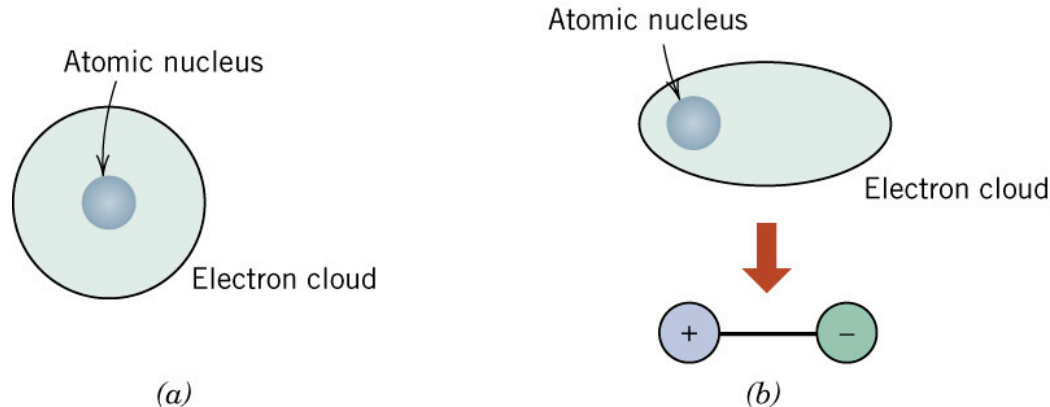


Fig. 2.13

(a) 전기적 대칭원자
(b) 유도된 원자 쌍극자.

- Polar molecule-induced dipole bonds

극성분자가 인접한 비극성 분자에 쌍극자 유도

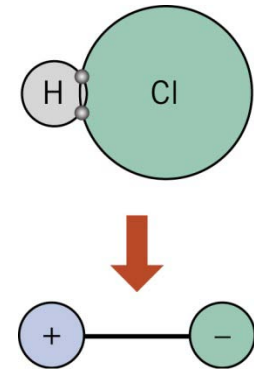


Fig. 2.14 극성분자인 HCl.

- Permanent dipole bonds

극성분자 사이에 존재 & 수소결합 (영구적 쌍극자)

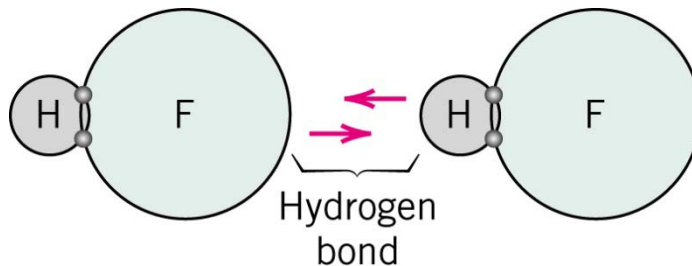


Fig. 2.15 HF의 수소결합.