

메탄 분자에서 수소 원자 사이의 거리

내적으로 두 벡터 끝점 사이의 거리 구하기

공학수학 II · 강의노트 §9.3 Example 풀이

1 문제

메탄 CH_4 에서 수소 원자는 정사면체의 네 꼭짓점에 있다. 탄소-수소 거리는 $1.10 \text{ \AA}$, H-C-H 결합각은 $\theta = 109.5^\circ$ 이다. 벡터만 써서 두 수소 원자 사이의 거리를 구한다.

2 풀이

탄소를 원점에 두고, 두 수소 원자의 위치 벡터를 $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ 라 하자. 그러면

$$\|\mathbf{a}\| = \|\mathbf{b}\| = 1.10, \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta.$$

두 수소 사이의 거리는 $\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|$ 이고, 내적의 성질로 전개하면

$$\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2 = (\mathbf{a} - \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{a} - \mathbf{b}) = \|\mathbf{a}\|^2 - 2\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \|\mathbf{b}\|^2 = 2(1.10)^2(1 - \cos 109.5^\circ).$$

$\cos 109.5^\circ \approx -0.33381$ 이므로 $\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|^2 \approx 2.42 \times 1.33381 \approx 3.2278$.

답

$$d = \|\mathbf{a} - \mathbf{b}\| = 1.10\sqrt{2(1 - \cos 109.5^\circ)} \approx 1.80 \text{ \AA}.$$

(이는 코사인 법칙과 같은 식이다. 또 $1 - \cos \theta = 2 \sin^2(\theta/2)$ 이므로 $d = 2(1.10) \sin(\theta/2)$ 로도 쓸 수 있다.)

3 좌표로 확인

정육면체의 꼭짓점을 번갈아 고르면 정사면체가 된다. 네 수소 원자를

$$\mathbf{h}_1 = s\langle 1, 1, 1 \rangle, \quad \mathbf{h}_2 = s\langle 1, -1, -1 \rangle, \quad \mathbf{h}_3 = s\langle -1, 1, -1 \rangle, \quad \mathbf{h}_4 = s\langle -1, -1, 1 \rangle, \quad s = \frac{1.10}{\sqrt{3}}$$

에 두면 $\|\mathbf{h}_i\| = 1.10$ 이다. 이때 $\mathbf{h}_1 \cdot \mathbf{h}_2 = s^2(1 - 1 - 1) = -s^2$ 이므로 $\cos \theta = \frac{-s^2}{3s^2} = -\frac{1}{3}$, $\theta = \arccos(-1/3) \approx 109.47^\circ$ 로 주어진 결합각과 일치한다. 또 $\mathbf{h}_1 - \mathbf{h}_2 = s\langle 0, 2, 2 \rangle$ 이므로 $d = 2\sqrt{2}s = 2\sqrt{2}(1.10)/\sqrt{3} \approx 1.796 \text{ \AA}$ 이다.

비고. 정사면체에서는 여섯 쌍의 H-H 거리가 모두 같다. 위의 좌표에서 어느 두 $\mathbf{h}_i - \mathbf{h}_j$ 도 성분 두 개가 $\pm 2s$, 하나가 0이기 때문이다.

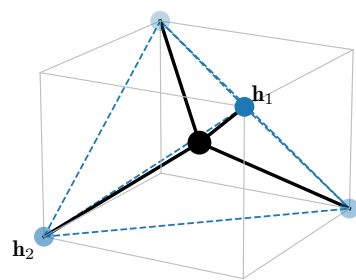


그림 1: 정육면체의 꼭짓점 네 개에 놓인 수소 원자(파랑)와 중심의 탄소 원자(검정). 모든 H-H 거리가 같다.