

# Ab initio calculations of SuperHeavy elements and their compounds

“정말 무거운 원소에서는 어떤 현상들이 나타날 것인지 계산화학으로 밝혀 보자.”

발표자 : 손상길

지도교수 : 이윤섭

날짜 : 1998. 5. 18. 오후 4시

장소 : 자연과학동 2124호

## 주기율표

주기율표, 이것은 자연이 내린 가장 정교한 규칙적인 배열 중 하나일 것이다. 1937년 43번 원소인 Technetium이 인공적으로 처음 만들어진 이후로 많은 화학자들과 물리학자들이 주기율표의 확장에 관심을 가져왔다.

Superheavy element는 7주기에 해당하며 5f, 6d, 7s, 7p의 orbital을 valence로 가지는 원자번호 104번 이상의 무거운 원소를 말한다. 근래에 들어 핵물리와 분석기술의 발달로 새로운 원소들이 많이 탄생하였고, 수년간의 논쟁 끝에 1997년 104~109번 원소에 대해 새로운 이름들이 부여되었다.

Superheavy element가 되면서 예상되었던 주기율성이 깨어지는 것이 여러 실험과 계산 결과에 의해 밝혀졌다. 원소가 무거워질수록 light element에서는 보기 힘들었던 여러가지 현상들이 나타나게 되며, 이들을 설명해주기 위해서는 상대성 효과가 고려되어야 한다. 상대성 효과는 superheavy element의 전자 구조에 많은 영향을 끼치게 되어 electronic configurations, ionization potentials, ionic/atomic radii, oxidation states, complexing states 등 여러 화학적, 물리적 성질에서 같은 족의 lighter element들과는 다른 경향성을 보여주게 된다.

72	73											
Hf	Ta											
104	105	106	107	108	109	110	111	112				
Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub				

Superheavy element는 대부분 수 msec, 길어야 수 sec 정도의 반감기를 가지는 데다가 만들어지는 원소가 극소량이므로 원소의 물성이나 화합물의 특성을 실험적으로 관측하기란 매우 어려운 일이다. 따라서 상대성 효과를 감안한 양자화학 계산을 통하여 superheavy element의 성질을 예측하고자 많은 연구가 진행 중이다.

본 세미나에서는 지금까지 만들어진 superheavy element의 역사와 현재 연구의 진행 방향에 대해서 간단히 소개하고, 상대성 효과를 포함한 계산 결과를 통하여 상대성 효과가 superheavy element에 어떤 영향을 주는지 알아보고자 한다.

무한탐구에 대한 인간의 욕심은 어디까지일까? 현재까지 112번 원소까지 실험적으로 만들어졌으며 새로운 원소를 만들고자 하는 열망은 앞으로도 계속될 것이다.

## 참고문헌

1. Pershina, V. G. *Chem. Rev.* **1996**, 96, 1977-2010.
2. <http://www.shef.ac.uk/chemistry/web-elements/>