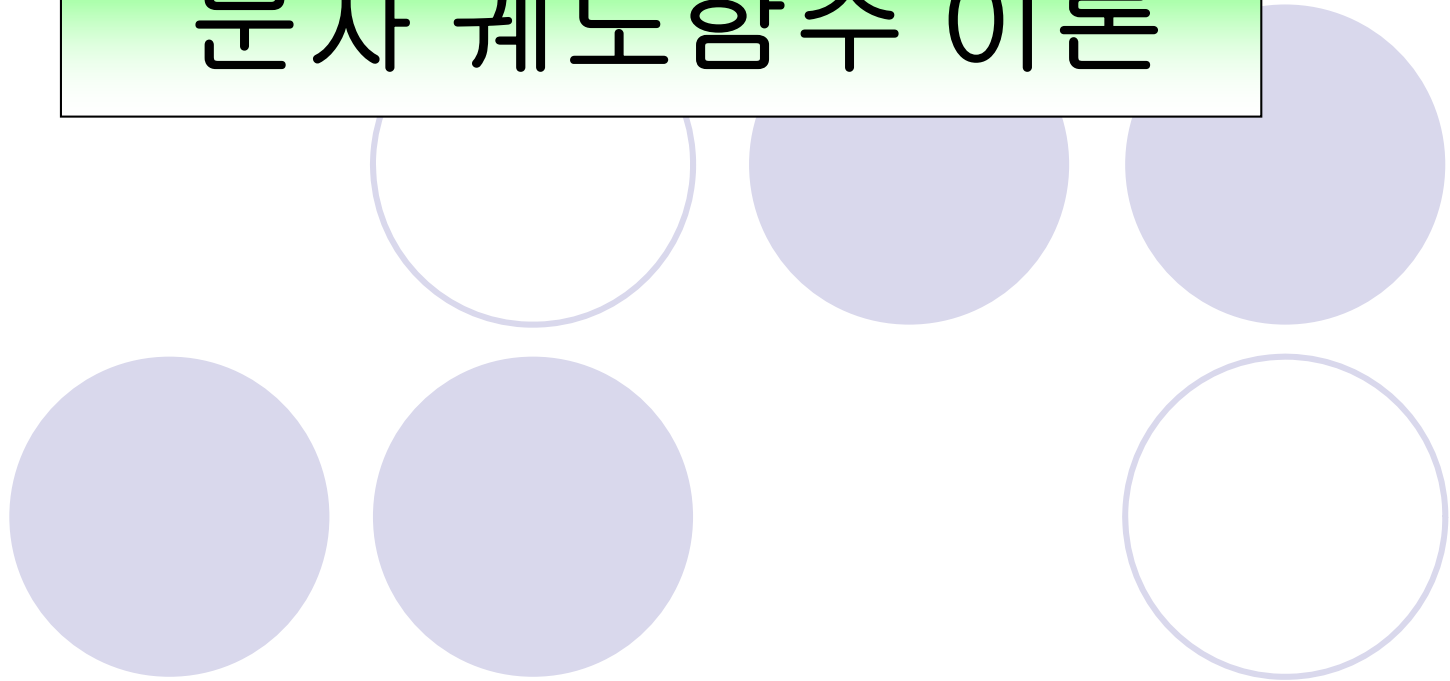


# 분자 궤도함수 이론



# 1. 분자 궤도함수 이론

## 2. 혼성화

2.1  $sp^3$  궤도함수와 Methane의 구조

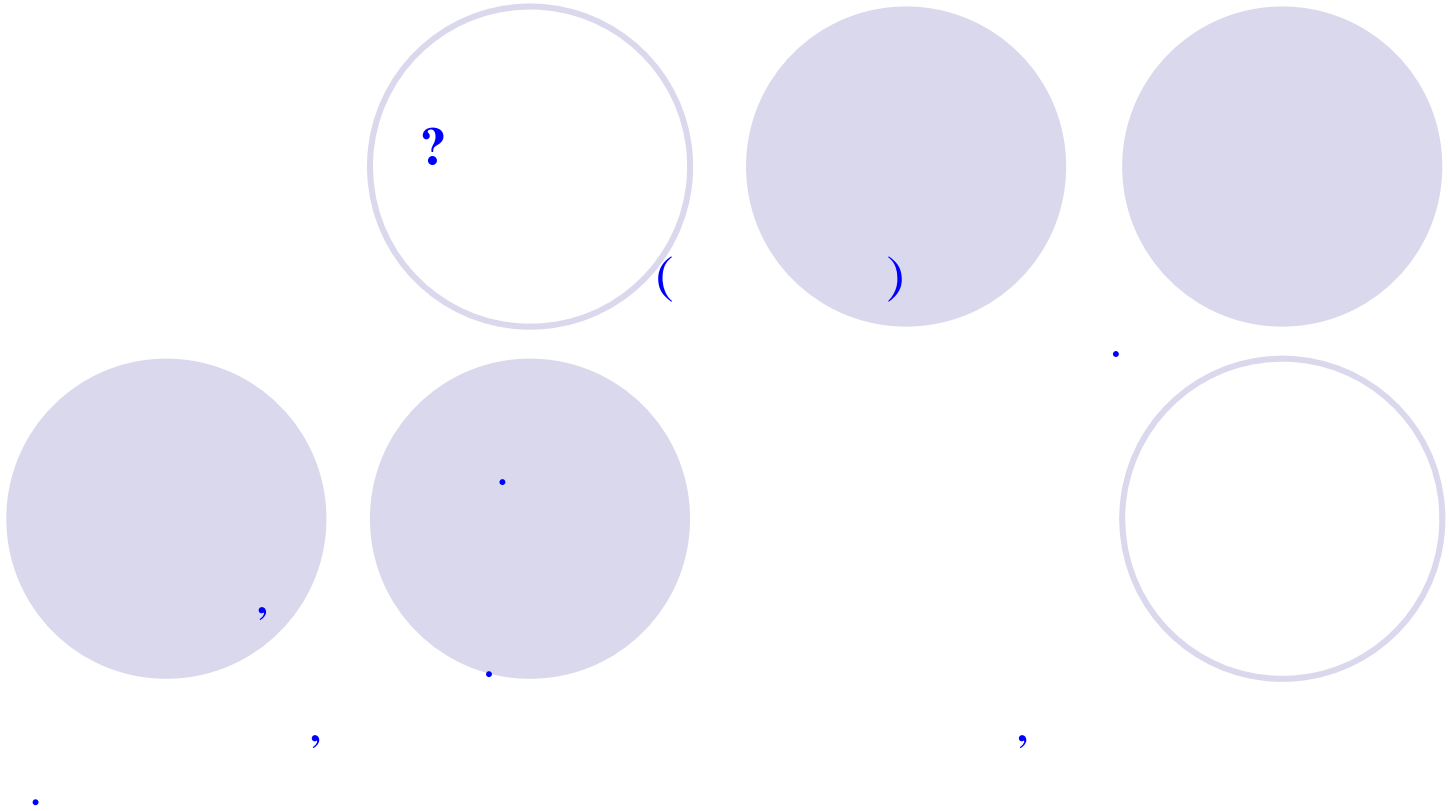
2.2 Ethane의 구조

2.3  $sp^2$  궤도함수와 Ethylene의 구조

2.4  $sp$  궤도함수와 acetylene의 구조

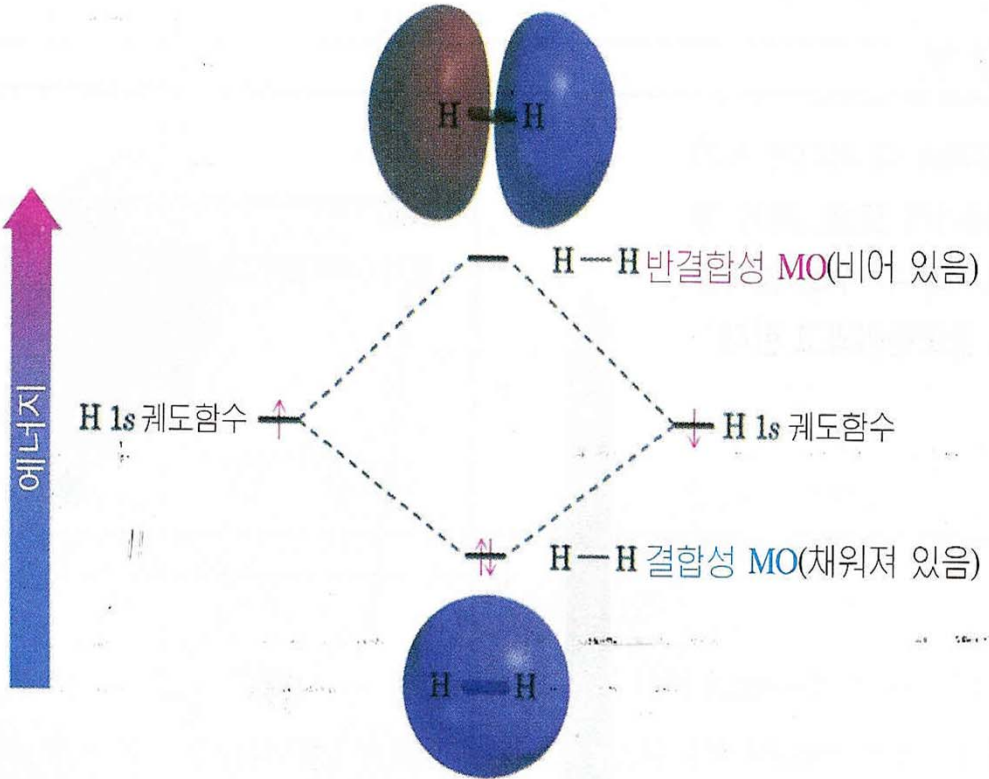
2.5 다른 원자의 혼성화 (질소 및 산소)

# 1.1 분자 궤도함수 이론의 정의

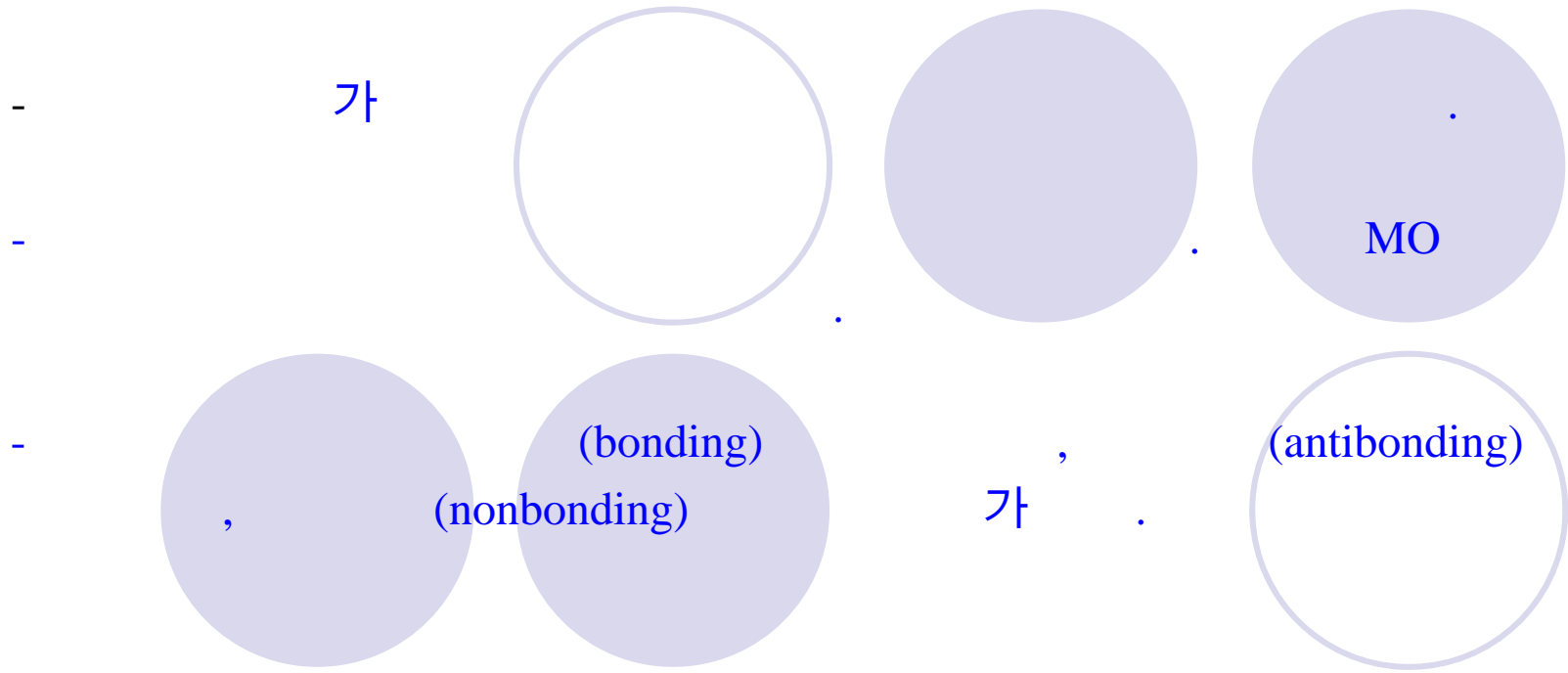


# H<sub>2</sub>의 분자 궤도 함수

컴퓨터로 그린 H<sub>2</sub>의 분자궤도 함수; 두 수소 원자의 1s 궤도함수 두 개가 서로 결합하여 두 개의 H<sub>2</sub> 분자 궤도함수를 만든다. 더 낮은 에너지의 결합성 MO는 채워져 있고, 보다 높은 에너지의 반결합성 MO는 비어 있다.

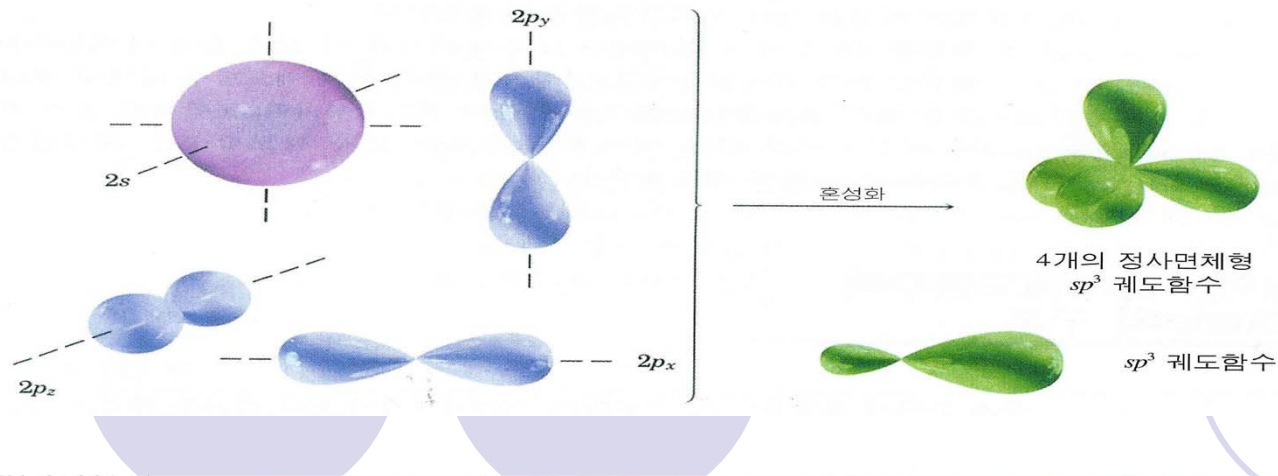


# 1.2 분자 궤도함수 이론의 중점 요약

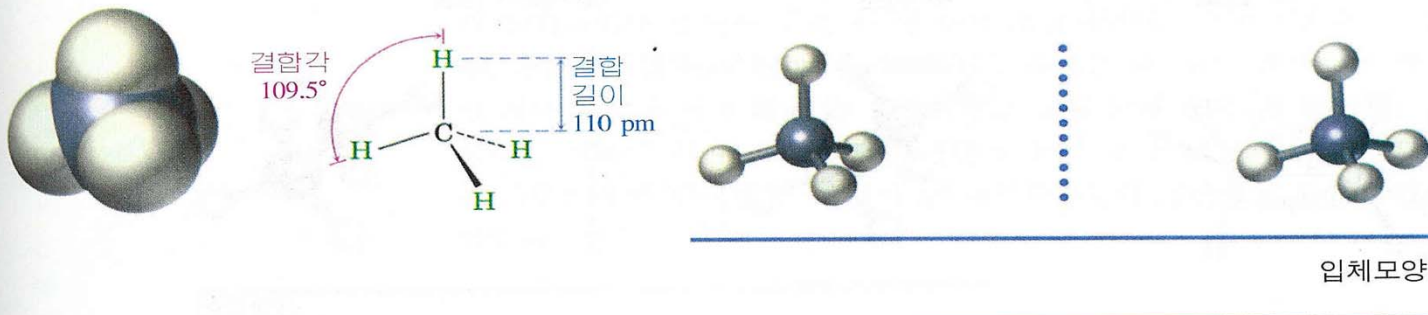


# 2.1 $sp^3$ 궤도함수와 Methane의 구조

한 개의  $s$  궤도함수와 세 개의  $p$  궤도함수의 조합으로 만들어진 네 개의  $sp^3$  혼성 궤도함수.  $sp^3$  혼성 궤도함수는 정사면체의 각 꼭지점을 향하고 있다.  $sp^3$  혼성 궤도함수는 핵에 대해 비대칭적이고 방향성을 갖으며 다른 원자와 궤도함수가 겹치면 강한 결합을 형성한다.



Methane의 구조 ; 그림은 컴퓨터로 그린 것이다.



## 2.2 Ethane의 구조

Ethane의 구조 ; 탄소-탄소 결합은 두 탄소의  $sp^3$  혼성 궤도함수의  $\sigma$  겹침에 의해 형성된다. ( $sp^3$  혼성 궤도함수의 작은 로우브는 나타내지 않았다.)



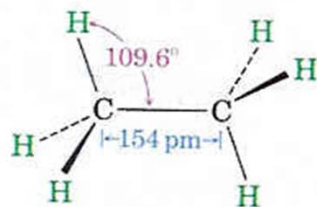
$sp^3$  탄소



$sp^3$  탄소



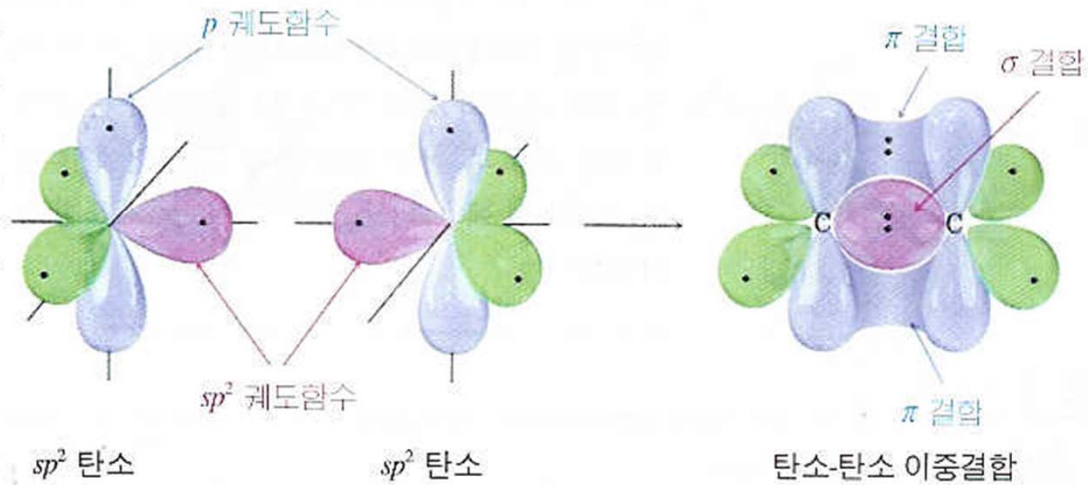
$sp^3-sp^3$   $\sigma$  결합



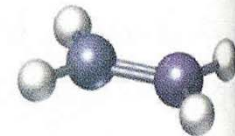
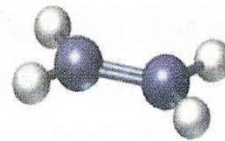
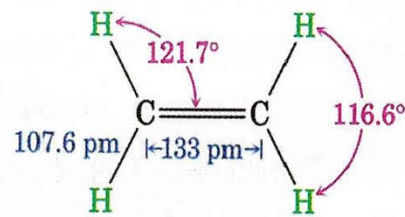
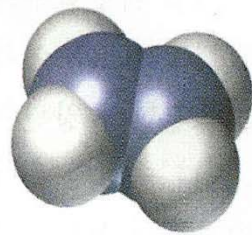
입체모양

## 2.3 $sp^2$ 궤도함수와 Ethylene의 구조

탄소-탄소 이중결합을 형성하기 위한  $sp^2$ -혼성 탄소의 궤도함수 겹침. 이중결합중 한 부분은  $sp^2$  궤도함수의 정면 겹침으로 생긴  $\sigma$ 결합이고 다른 한 부분은 혼성화되지 않은  $p$  궤도함수들의 측면 겹침에 의해 생긴  $\pi$ 결합이다.  $\pi$ 결합은 핵 사이에 연결된 양편을 따라 전자 밀도 영역을 가지고 있다.



Ethylene 의 구조

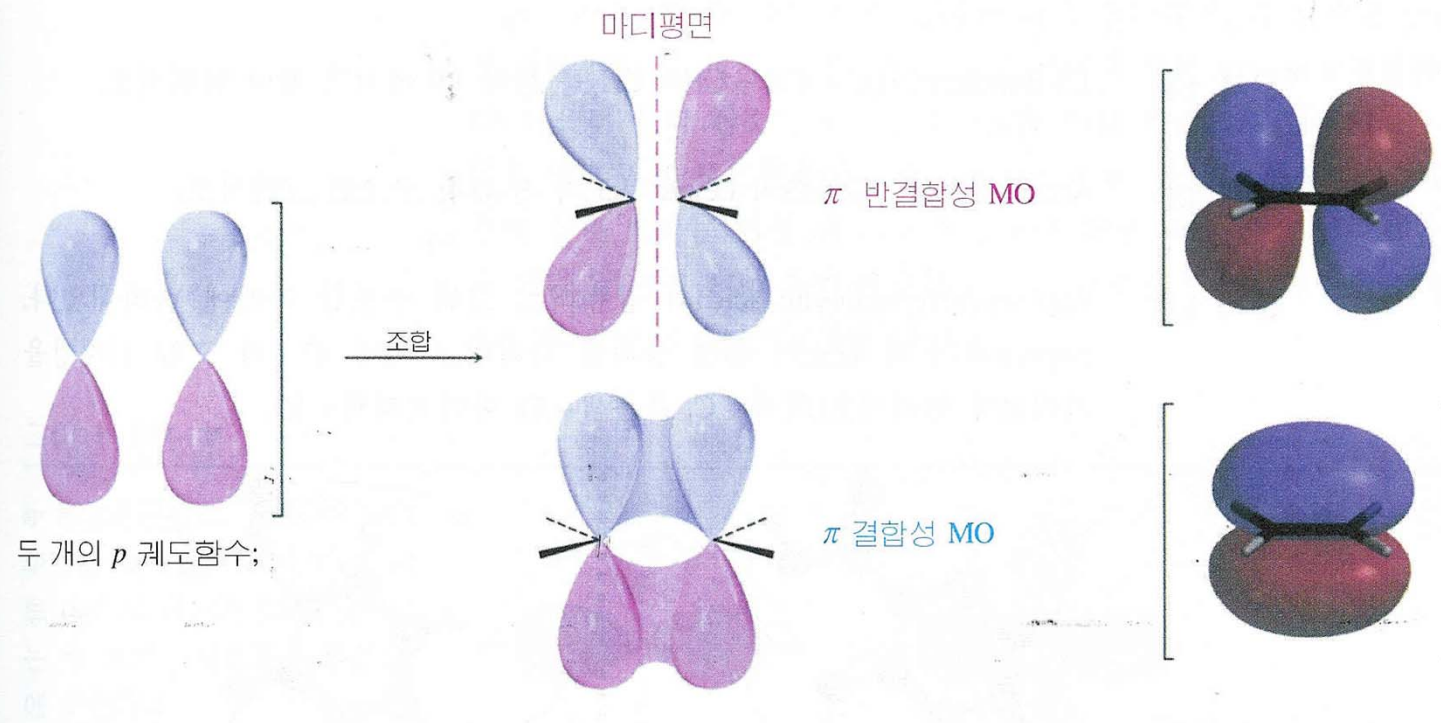


입체 모양



# C=C $\pi$ 결합의 분자 궤도 함수

C=C  $\pi$  결합의 분자 궤도 함수 표현,  $\pi$  결합성 MO 는 원자 궤도 함수들의 부가조합에 의해 생기고 채워졌다.  $\pi$  반결합성 MO는 원자 궤도 함수들의 상쇄조합에 의해 생기고 비어있다. 맨 오른쪽의 표현은 정확성을 위해 컴퓨터로 그린 것이다.



## 2.4 $sp$ 궤도함수와 acetylene의 구조

Acetylene의 구조. 두 개의  $sp$ -혼성 탄소 원자가 한 개의  $sp-sp$   $\sigma$ 결합과 두 개의  $p-p$   $\pi$ 결합에 의해 연결되어 있다.

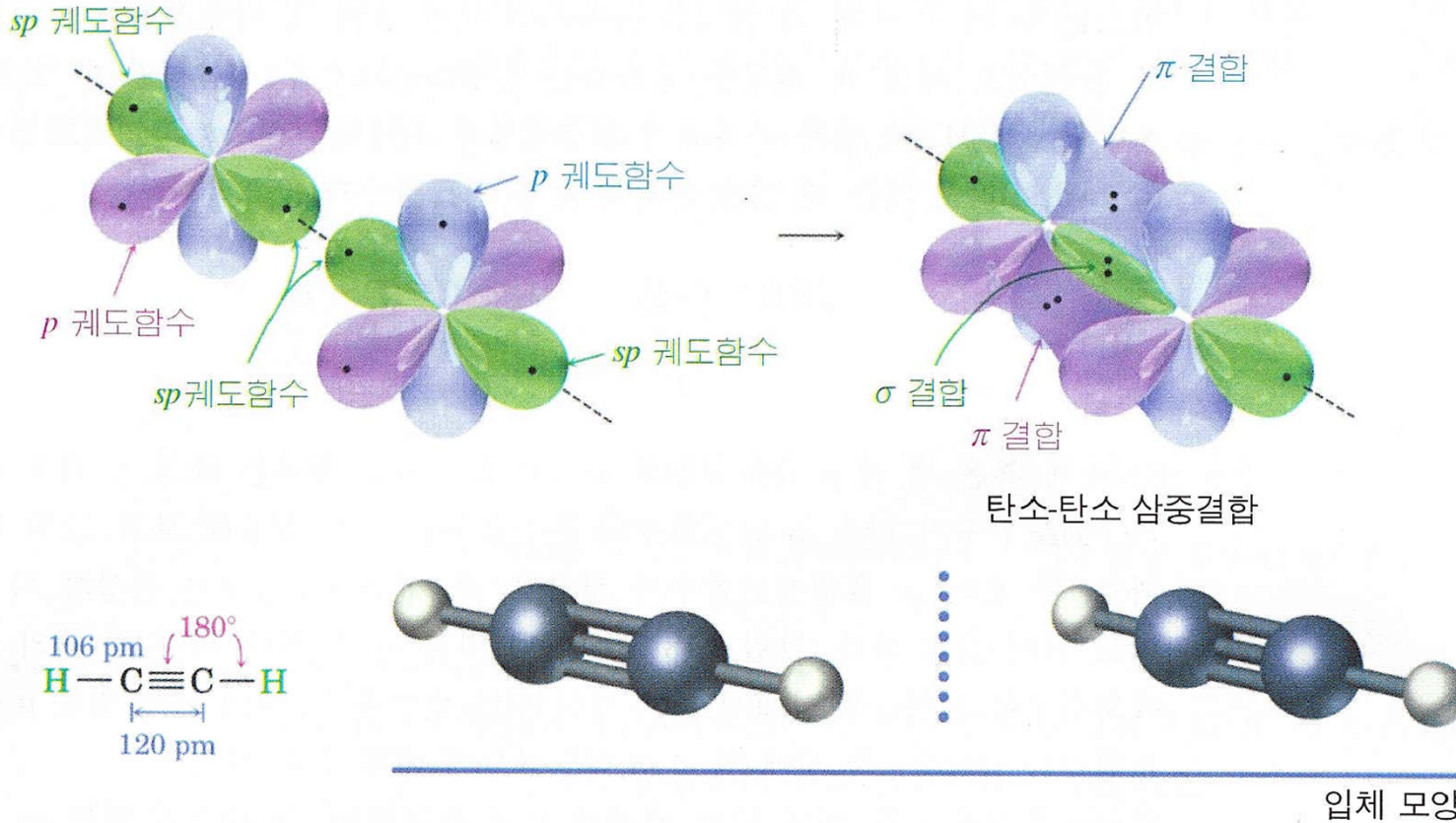
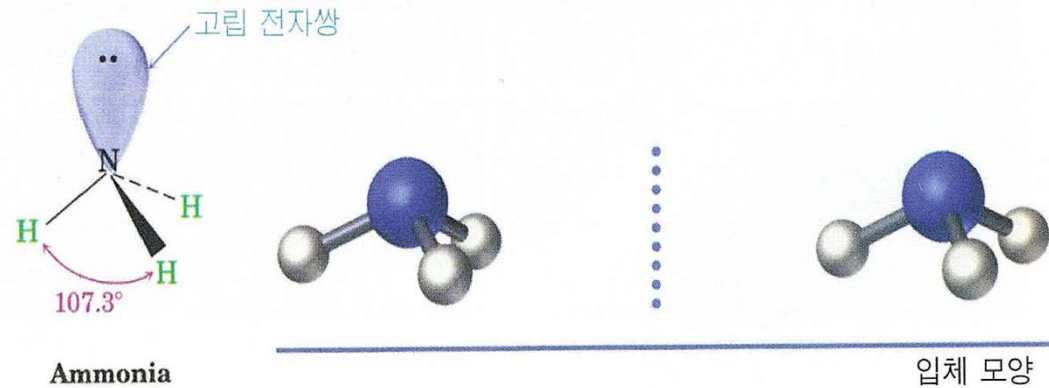


표 1.3 Methane, ethane, ethylene 및 acetylene의 C-C 및 C-H 결합의 비교.

분자	결합	결합 세기		결합길이(pm)
		(kJ/mol)	(kcal/mol)	
Methane, CH <sub>4</sub>	C <sub>sp<sup>3</sup></sub> -H <sub>1s</sub>	483	105	110
Ethane, CH <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	C <sub>sp<sup>3</sup></sub> -C <sub>sp<sup>3</sup></sub>	376	90	154
	C <sub>sp<sup>3</sup></sub> -H <sub>1s</sub>	420	100	110
Ethylene, H <sub>2</sub> C = CH <sub>2</sub>	C <sub>sp<sup>2</sup></sub> = C <sub>sp<sup>2</sup></sub>	661	146	133
	C <sub>sp<sup>2</sup></sub> -H <sub>1s</sub>	444	106	107.6
Acetylene, HC ≡ CH	C <sub>sp</sub> ≡ C <sub>sp</sub>	835	200	120
	C <sub>sp</sub> -H <sub>1s</sub>	552	132	106

## 2.5 다른 원자의 혼성화 (질소 및 산소)

Ammonia에 있어서 질소의 혼성화; 질소 원자는  $sp^3$ -혼성화되어 있고, H-N-H 결합 각은  $107.3^\circ$ 이다.



물의 구조; 산소 원자는  $sp^3$ -혼성이고 두 개의 고립 전자쌍을 가지고 있다. H-O-H 결합각은  $104.5^\circ$ 이다.

