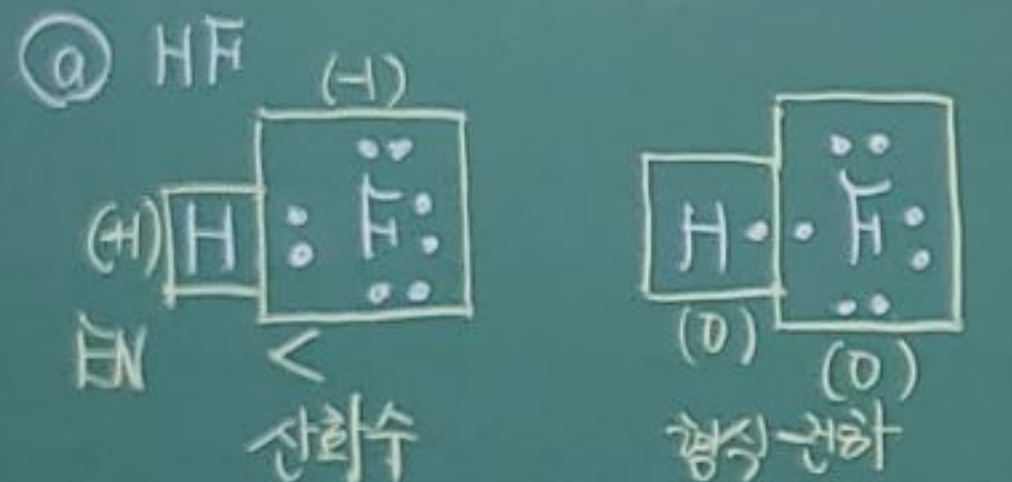


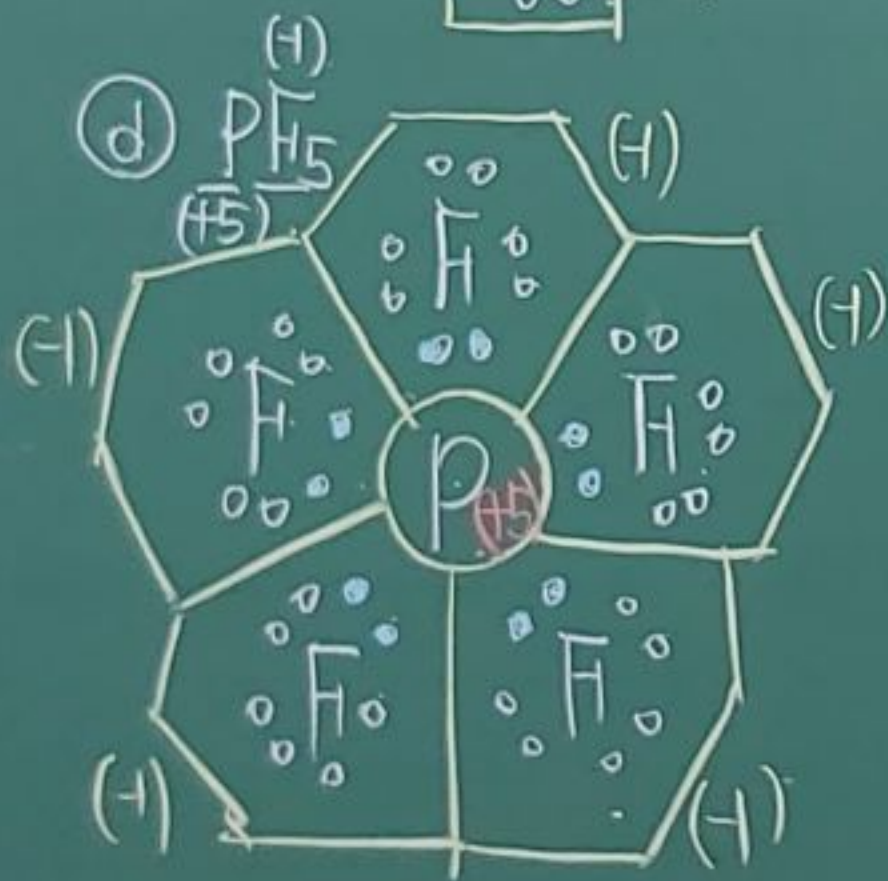
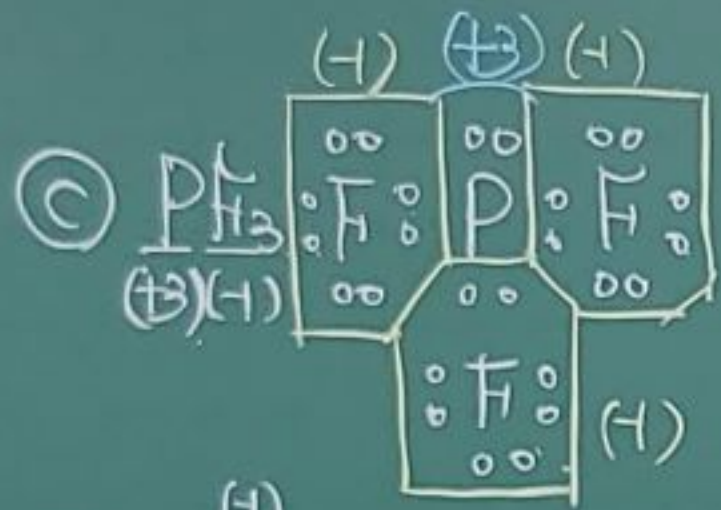
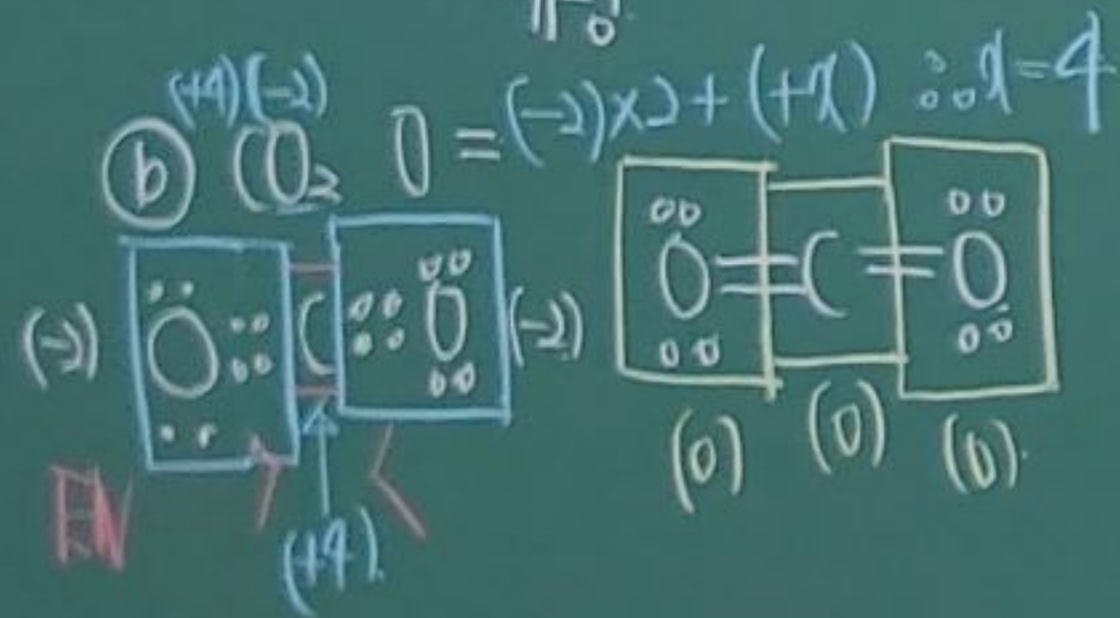


(三) 数学 数学



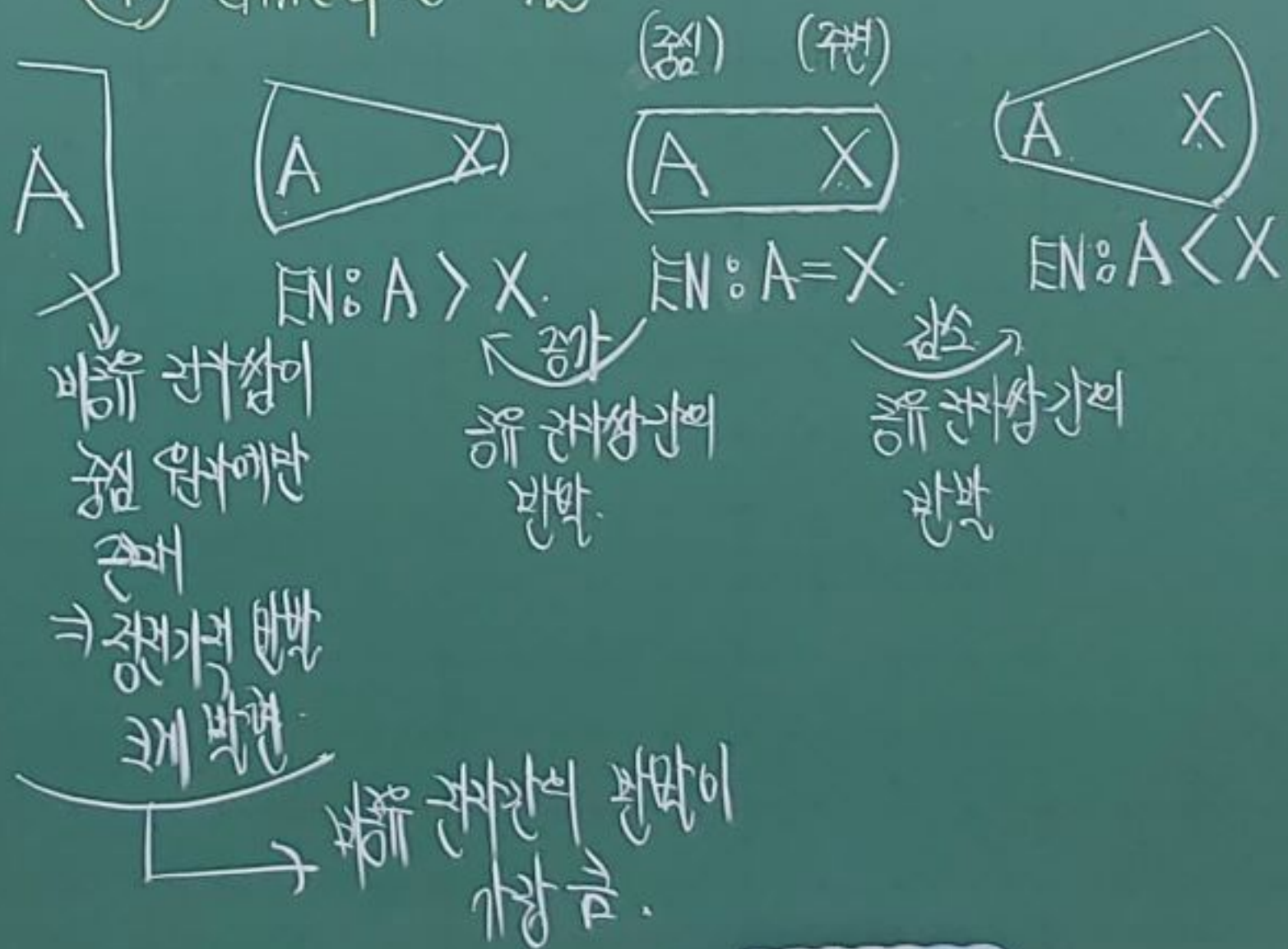
-쉬운 이해 -쉬운 응용

平



(3) VSEPR의 원리: 루이스 전자쌍극을 기반으로 해서  
 $\Rightarrow$  양이온의 입체적인 모양은  
정성적으로 예측 및 설명하는 체계

① Gillespie 애플

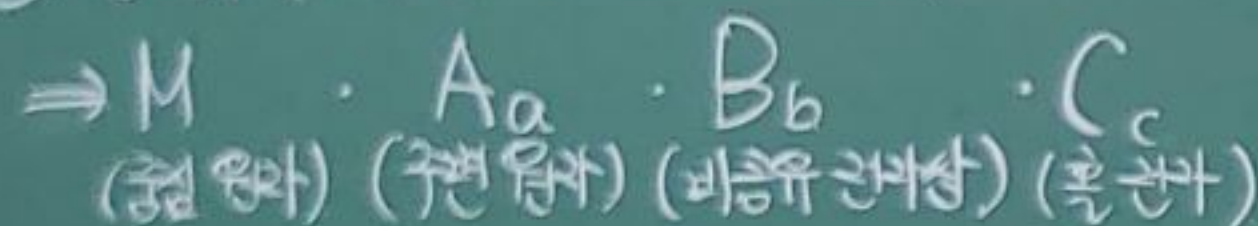


⇒ L.P.간의 > L.P.와 B.P.간의 > B.P.간의  
 만만 만만 만만  
 중의 위치에  
 알맞아서

## ② 이상적인 분자의 모양에 관한 예

### ① 중심 원자 개수

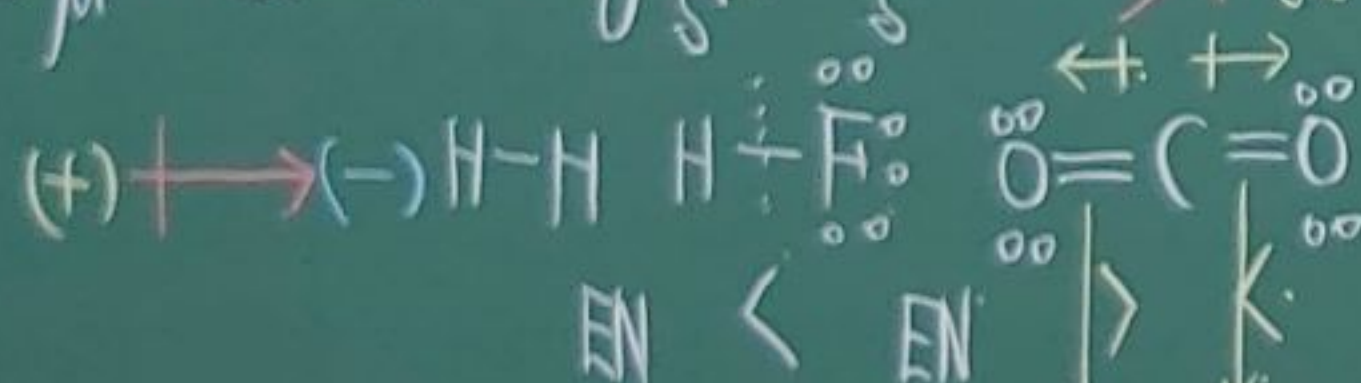
#### ① 입체수 (Steric Number: S.N.)



$$\Rightarrow \text{입체수} = a + b + c = 2 \sim 6$$

#### ② 쌍극자 모멘트 ( $\mu$ ): 개별 $\mu$ , 총 합 $\mu$

$$1) \text{개별: } \mu = Q \times r = \delta \times r$$



쌍극자 모멘트  
쌍극자 모멘트  
쌍극자 모멘트

쌍극자 모멘트  
쌍극자 모멘트  
쌍극자 모멘트

### ③ 혼성 궤도함수

- 표기법
- 1)  $sp = sp^1$  (S.N.=2)
  - 2)  $sp^2 = sp^2$  (S.N.=3)
  - 3)  $sp^3 = sp^3$  (S.N.=4)
  - 4)  $sp^3d = sp^3d^1$  (S.N.=5)
  - 5)  $sp^3d^2 = sp^3d^2$  (S.N.=6)

크기는 동일  
방향이 반대

무극성  
분자(총합)

## ① 대표적인 예 ( $MA_a = 2 \sim 6$ ) $\rightarrow$ 모든 예의 $\mu = 0$ 인 무극성 분자 point group

| 입체수 | 분자의 모양                              | 점군        | 예                             | 결합각         | 혼성 궤도함수 | 점군             |
|-----|-------------------------------------|-----------|-------------------------------|-------------|---------|----------------|
| 2   | (직선형 구조 $\rightarrow$ 직선형 구조)       | 직선형 구조    | $\text{H}-\text{Be}-\text{H}$ | $180^\circ$ | $sp$    | $D_{\infty h}$ |
| 3   | (평면 삼각형 구조 $\rightarrow$ 평면 삼각형 구조) | 평면 삼각형 구조 | $\text{BF}_3$                 | $120^\circ$ | $sp^2$  | $D_{3h}$       |

< 간단한 분자의 모양 예측 방법: ABC 방법 >: 중심 원자 1개인 경우

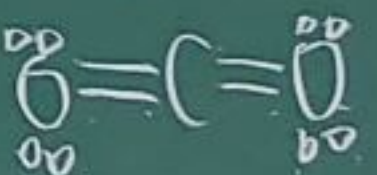
①  $\text{BeH}_2$ : 중심 원자의 원자가 전자수 (=2) - 주변 원자의 채워진 전자수 (=1x2)

$$= \text{비공유 전자쌍의 수} = 0 \Rightarrow \text{직선형 구조}$$

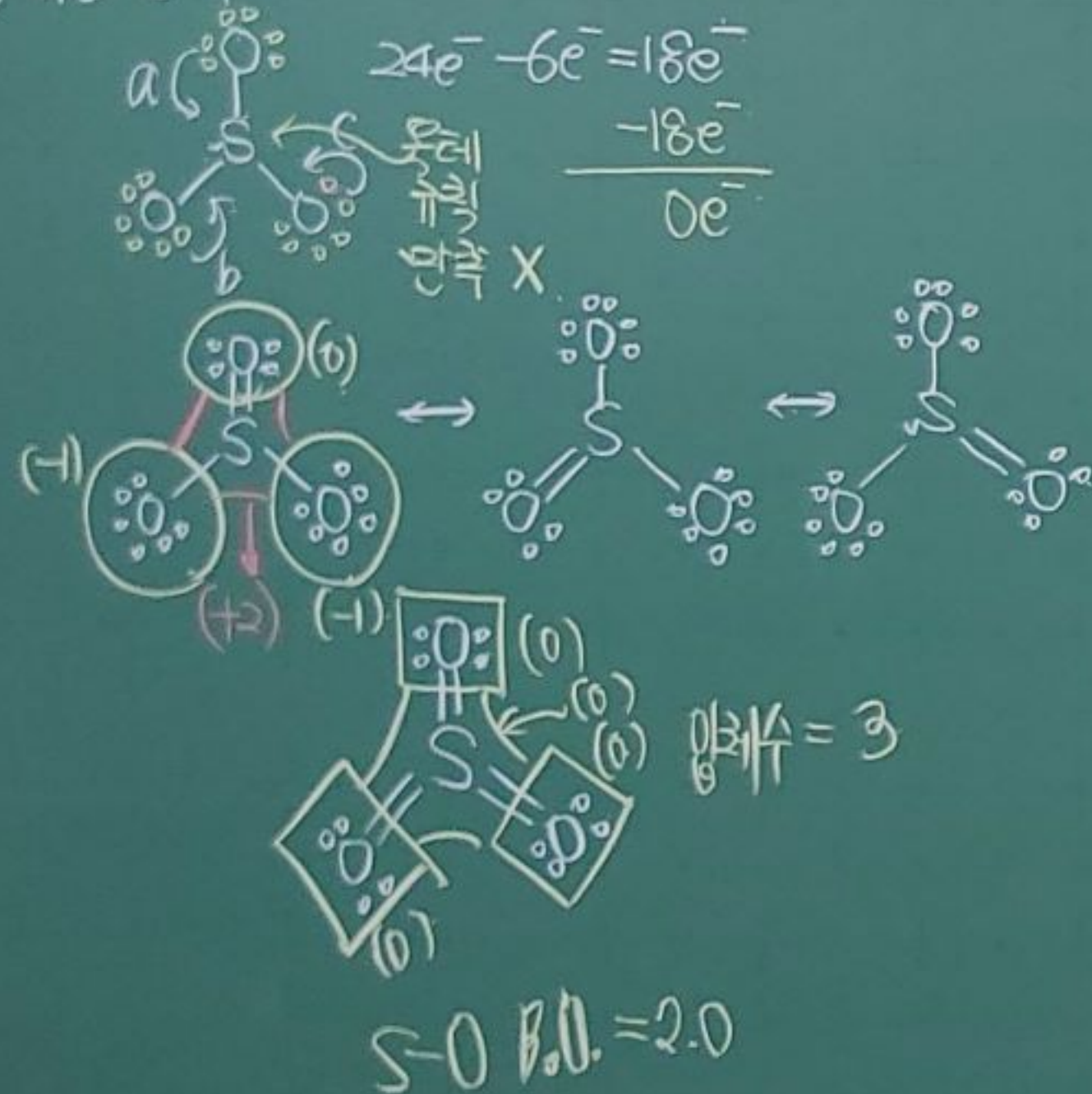
$$MA_2BOC_0 = MA_0$$

②  $\text{BF}_3$ :  $\frac{3 - 1 \times 3}{2} = 0$  쌍 MA<sub>3</sub> (입체수=3)

③  $\text{CO}_2$ :  $\frac{4 - 2 \times 2}{2} = 0$  쌍 MA<sub>2</sub> (입체수=2)

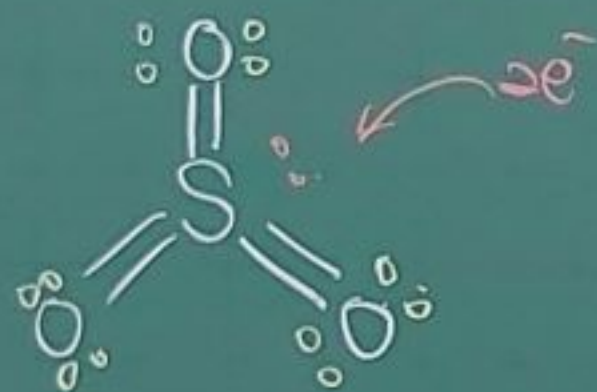


① 기존 방식



② ABC 방식 ( $SO_3$ )

$$\frac{6 - 2 \times 3}{2} = 0 \text{ 상}$$

$$\Rightarrow MA_3 (\text{양자수}=3)$$


4

중사면제  
구조

공사면제  
구조

농사면적  
구조

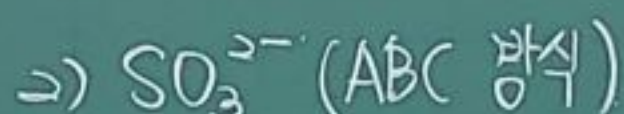
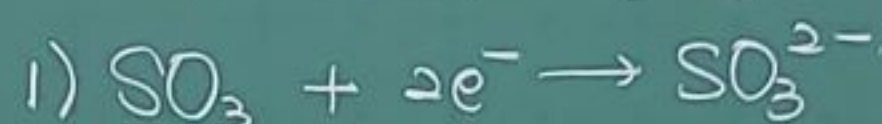
$$\text{CH}_4, \text{SiH}_4$$

$$\text{SO}_4^{2-}$$

109.5

 $109.5^\circ > 90^\circ$ 

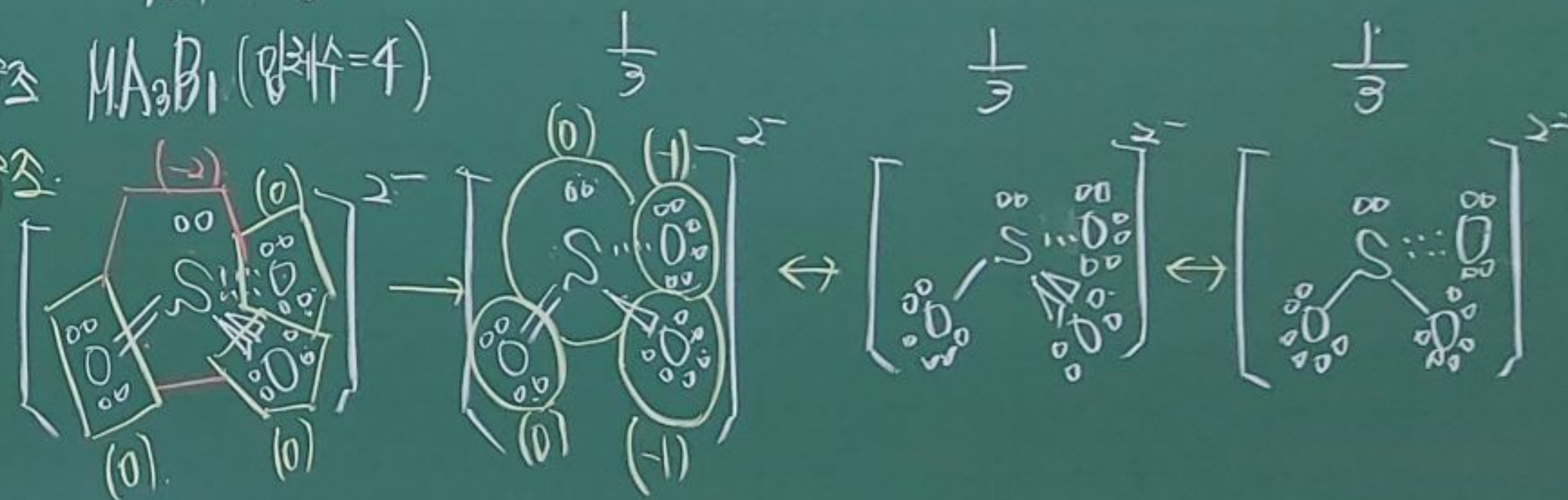
ICP-MS

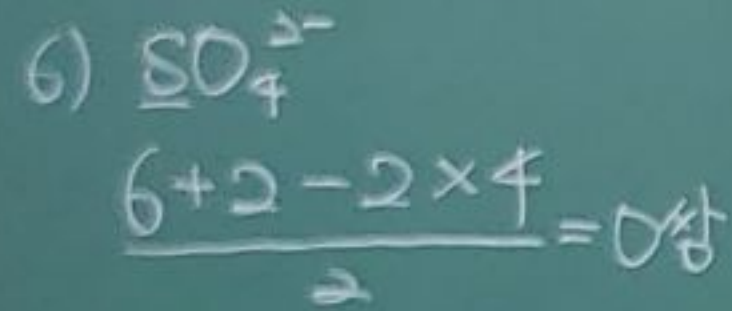
 $T_d$  $\langle \text{SO}_3^{2-}, \text{SO}_4^{2-} \rangle$ 

$$\frac{6+2-2 \times 3}{2} = 1 \text{ 쌍의 비공유 전자쌍}$$

3) 연속성 기하 구조  $MA_3B$  (양자수=4)

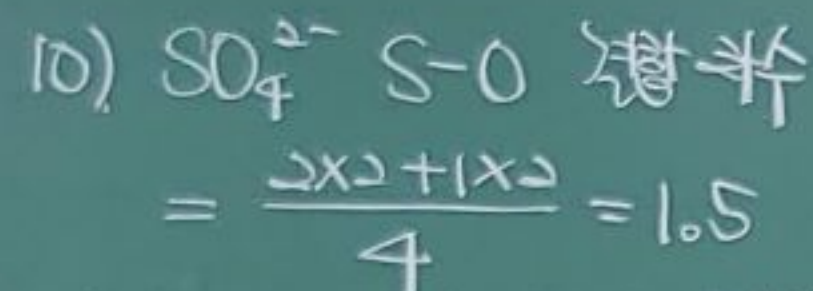
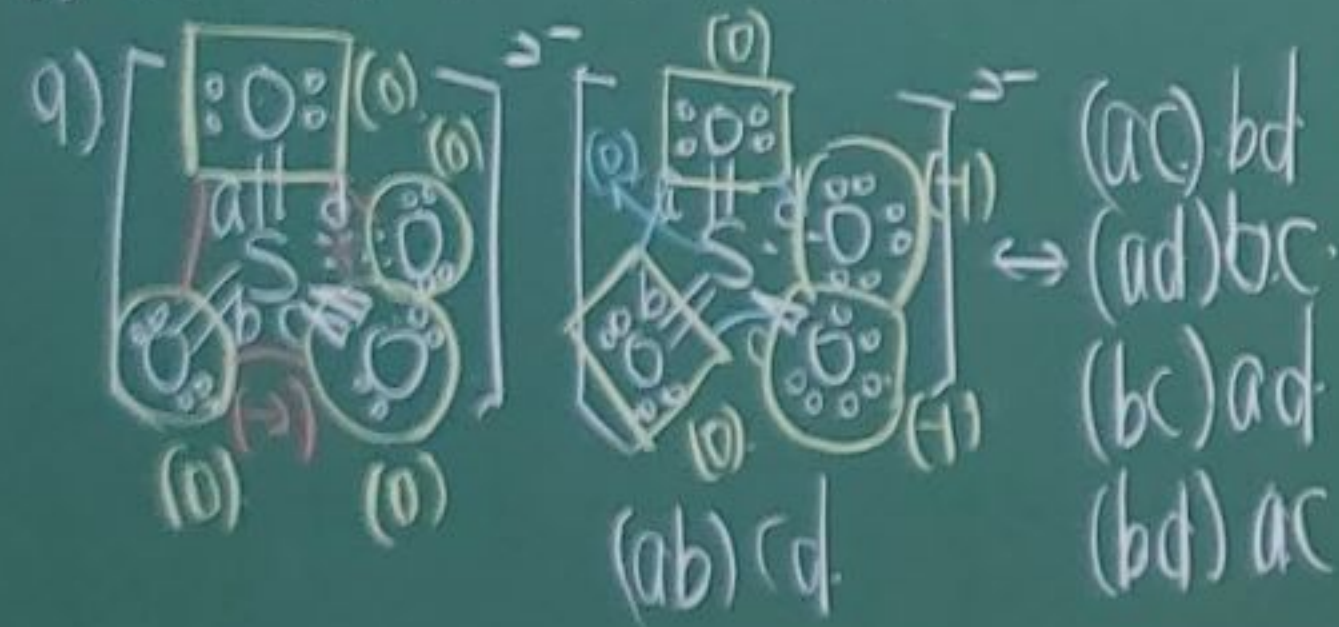
⇒ 사면체 구조





7) 전자쌍 기하 구조:  $\text{MA}_4$  (정사면체 구조)

8) 분자 기하 구조: 정사면체 구조



11) S-O 결합 길이가 증가하는 순서

예)  $\text{SO}_3, \text{SO}_3^{2-}, \text{SO}_4^{2-}$

B.O. 2.0  $\frac{4}{3} = 1.33$   $\frac{6}{4} = 1.5$

$\text{SO}_3 < \text{SO}_4^{2-} < \text{SO}_3^{2-}$

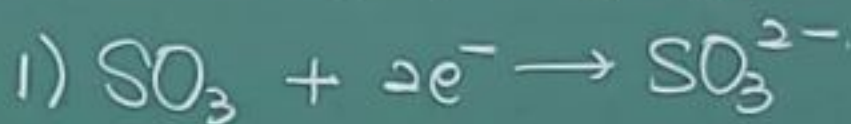
S-O 결합 길이 증가

(a) bd (c) ab  
 (ad) bc  
 (bc) ad  
 (bd) ac  
 $\Rightarrow \frac{1}{6}$

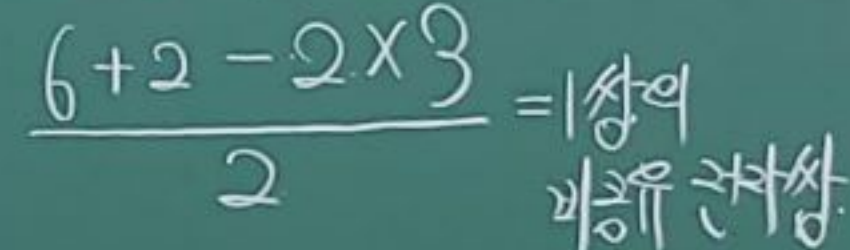
입체수 분자의 모양 전자쌍 기하 구조 분자 기하 구조

4 정사면체 구조 정사면체 구조 정사면체 구조

$< \text{SO}_3^{2-}, \text{SO}_4^{2-} >$

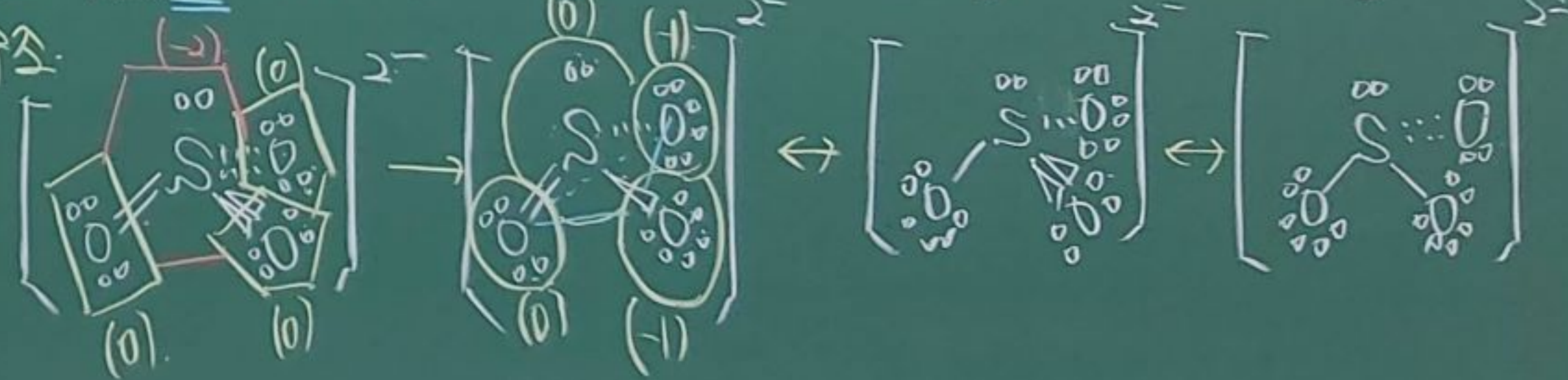


$\text{SO}_3^{2-}$  (ABC 방식)



3) 전자쌍 기하 구조  $\text{MA}_3\text{B}_1$  (입체수=4)

$\Rightarrow$  사면체 구조

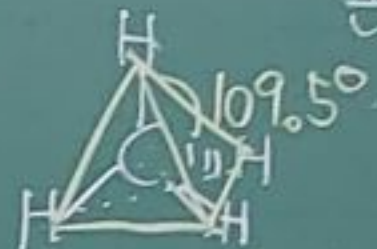


대표적인 예. 결합각

$\text{CH}_4, \text{SiH}_4$   $109.5^\circ > 90^\circ$

$\text{SO}_4^{2-}$   $sp^3$  혼성

2개의 원소



4)  $\text{SO}_3^{2-}$ 의 S-O 결합 길이  $>$   $\text{SO}_3$ 의 S-O 결합 길이  
 S-O B.O.  $<$  S-O B.O. = 2.0  
 $= \frac{4}{3} = 1.33$

VS. 분자 기하 구조 ( $\text{MA}_3$ 의 형태로 표현): 삼각뿔 구조

$\frac{1}{3}$   $\frac{1}{3}$   $\frac{1}{3}$

입체수 분자의 모양

원자당 기하 구조

원자 기하 구조

대표적인 예

전함각

혼성 궤도함수

대칭

$$5 - 1 \times 5 = 0 \text{ 쌍 (MA}_5\text{)}$$

5 선형성분 구조 ⑤

= 이중선형성분 구조

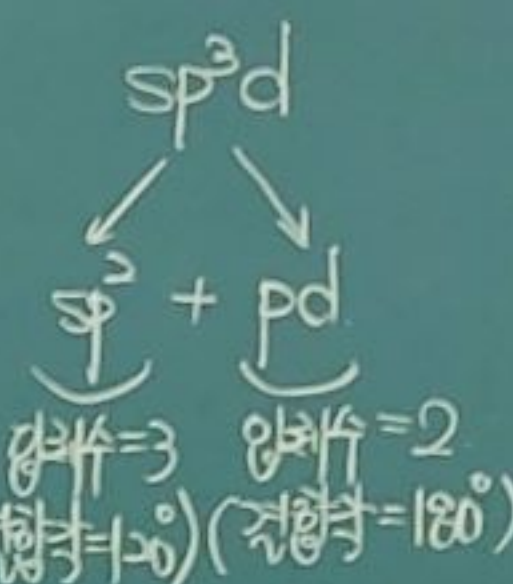
= TBP 구조

좌능

좌능



$$\begin{aligned} \angle \text{F}_{\text{수평}} - \text{P} - \text{F}_{\text{수평}} &= 120^\circ \\ \angle \text{F}_{\text{수평}} - \text{P} - \text{F}_{\text{수직}} &= 90^\circ \\ \angle \text{F}_{\text{수직}} - \text{P} - \text{F}_{\text{수직}} &= 180^\circ \end{aligned}$$

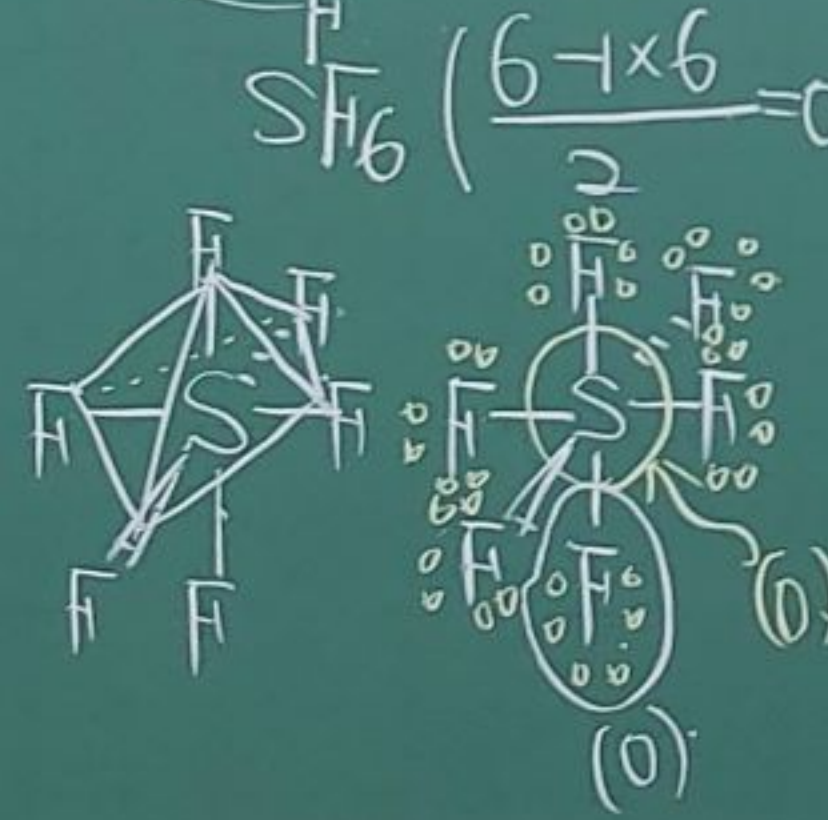


D<sub>3h</sub>

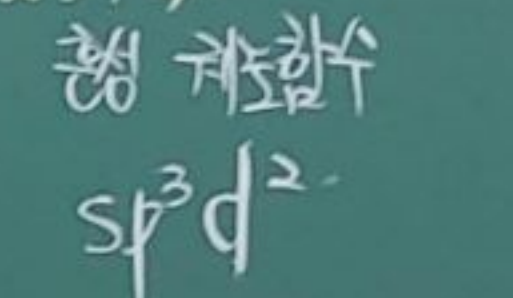
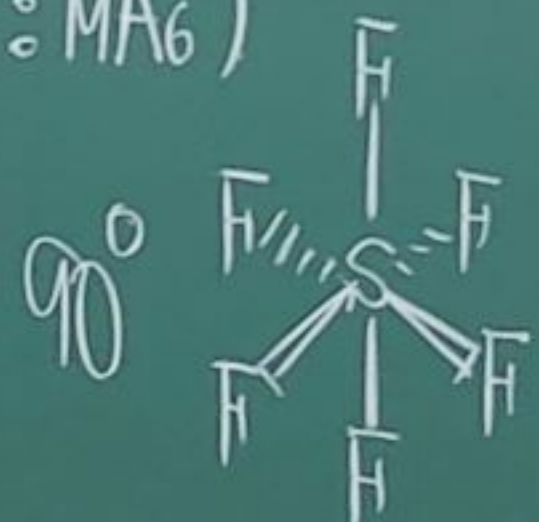
6 정팔면체 구조

좌능

좌능



$$\text{SF}_6 \quad (6 - 1 \times 6 = 0 \text{ 쌍} : \text{MA}_6)$$



O<sub>h</sub>

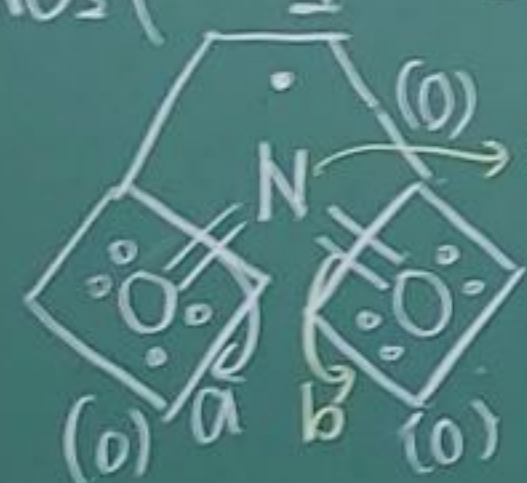


$$\begin{aligned} 5 + 4 \times 5 &= 40e^- \\ - 10e^- & \\ \hline 30e^- \\ - 5 \times 6e^- & \\ \hline 0e^- \end{aligned}$$

② 중심 원자에 비공유 전자쌍(홀 전자)이 없을 경우 ( $MA_aB_bC_c$ )

① 입체수 = 3 ( $NO_2$ ,  $NO_2^+$ ,  $NO_2^-$ )

④  $NO_2$  ( $\frac{5-2 \times 2}{2} = \frac{1}{2}$ 쌍 = 홀 전자 1개) :  $MA_2B_0C_1$  (입체수=3)  $\rightarrow$  평면 삼각형 구조

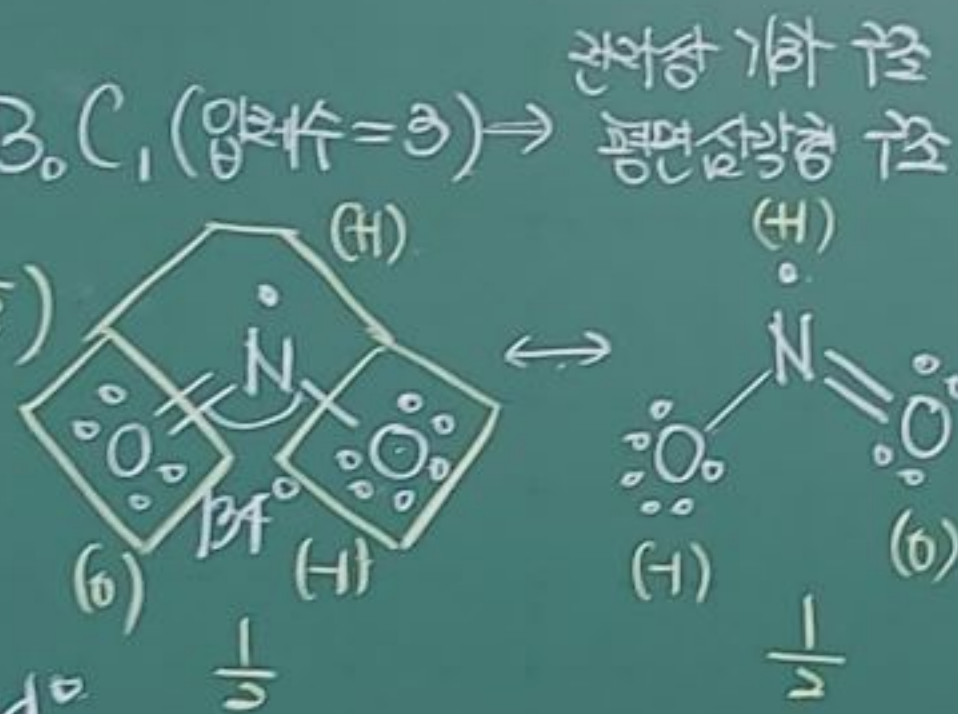


1) 전자 배치: 평면 삼각형 구조  $\Rightarrow$  결합각:  $134^\circ$

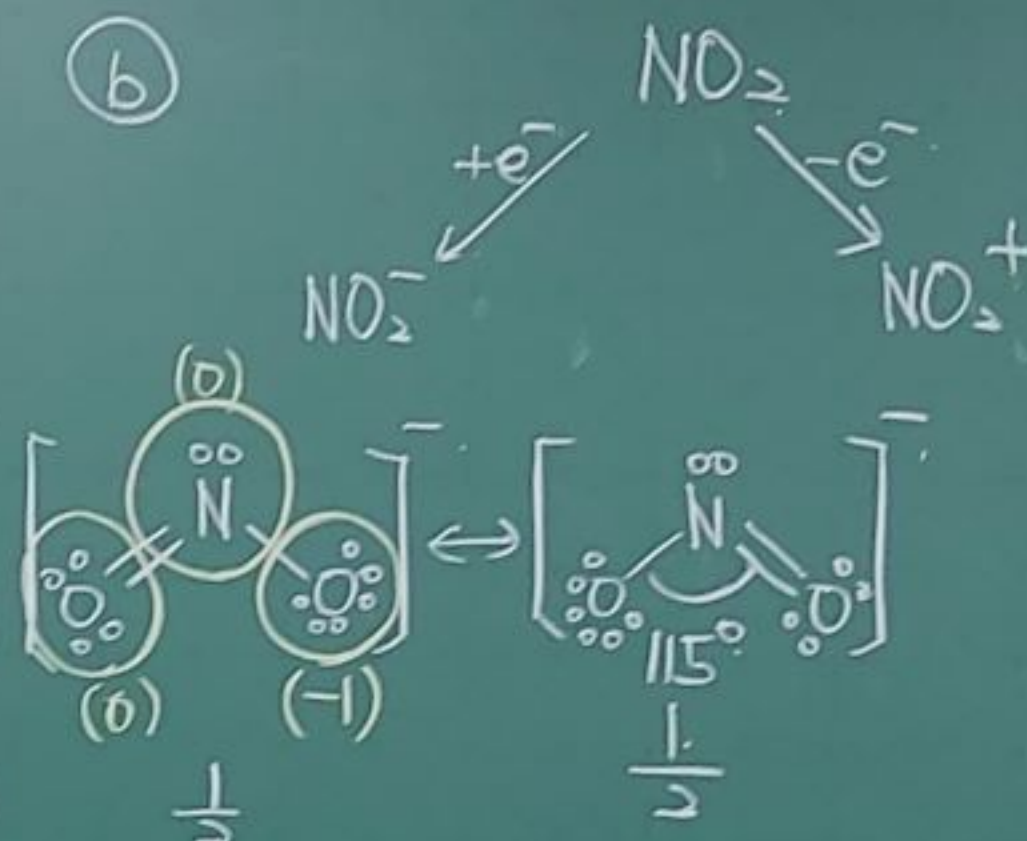
3) N-O 결합 차수(B.O.) =  $\frac{2+1}{2} = 1.5$

⑤ 결합각:  $NO_2^+ > NO_2 > NO_2^-$   
( $180^\circ$ ) ( $134^\circ$ ) ( $115^\circ$ )

⑥ 결합 길이:  $NO_2 \approx NO_2^- > NO_2^+$   
결합 차수: 1.5 2.0



⑥



1)  $NO_2^-$ 의 전자 배치: 평면 삼각형 구조

2)  $\frac{5+1-2 \times 2}{2} = 1$ 쌍 ( $MA_2B_1C_0$ )

3) 전자 배치: 평면 삼각형 구조

4) 결합각:  $115^\circ$

5) N-O 결합 차수 =  $\frac{2+1}{2} = \frac{1+2}{2} = 1.5$

1)  $NO_2^+$ :  $\frac{5-1-2 \times 2}{2} = 0$ 쌍 ( $MA_2B_0C_0$ )

2) 전자 배치: 선형 구조

3)  $[O=N=O]^+$   
 $180^\circ$

4) 전자 배치: 선형 구조

5) 결합각:  $180^\circ$

6) N-O 결합 차수 = 2.0