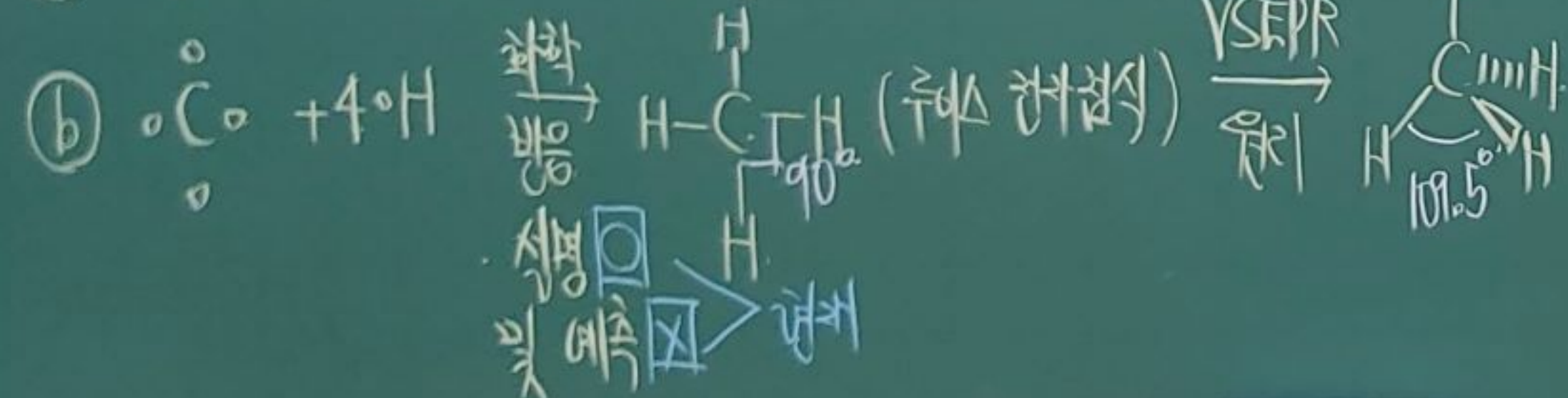
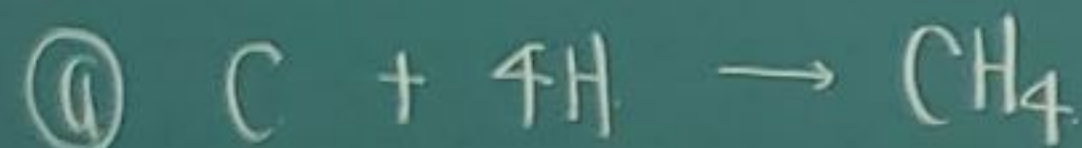


(4) 원소 계통수 이론

① 계통수 이론

- ① 계통 이론: 루이스 전자쌍의 $\times$ $\xrightarrow{\text{성명}}$ 간격으로 양의 구조로 존재
 VSEPR 원리 $\rightarrow$ 상대적 비교(연함상) - 성명 ○
 각 분자의 결합 형태
 전함상 - 성명 X (양자 역학 이론)

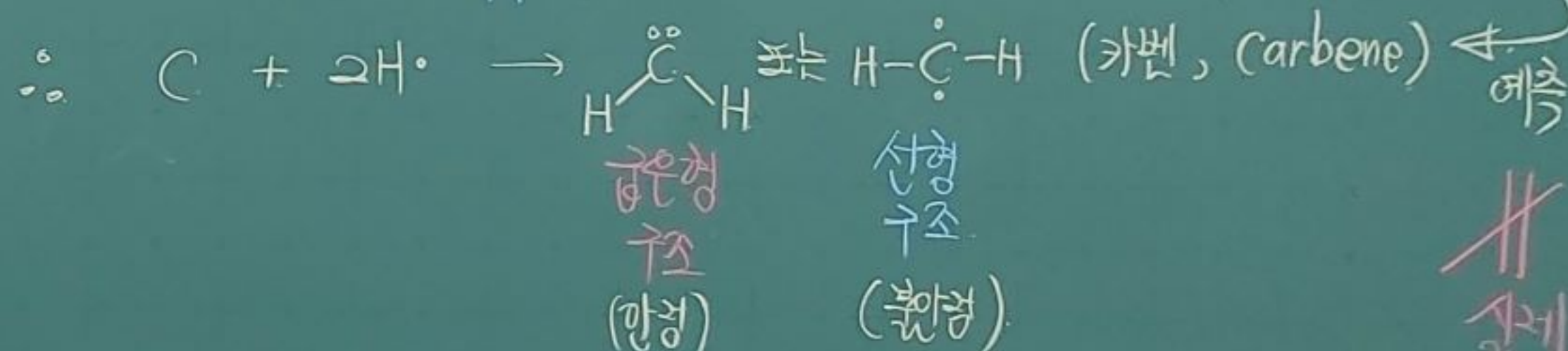
② 양자 화학 개념 이론 (특정 빛을 설명)



(C-H 결합 길이 짧음)
 (< H-C-H 결합 각도 짧음)

- ③ 양자 역학 (수소원 원자 $\xrightarrow{\text{계통수}} \text{전자쌍인 원자 계통수 이론}$)
 1) 중심 원자: C $1s^2 2s^2 2p^2$
 $\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \hline \end{array}$ (바닥 상태 전자 배치)
 - 혼 전자 수: 2개 } C가 반응하면

바닥 상태 전자 배치
 • Aufbau 원리
 • Pauli 배타 원리
 • Hund의 규칙

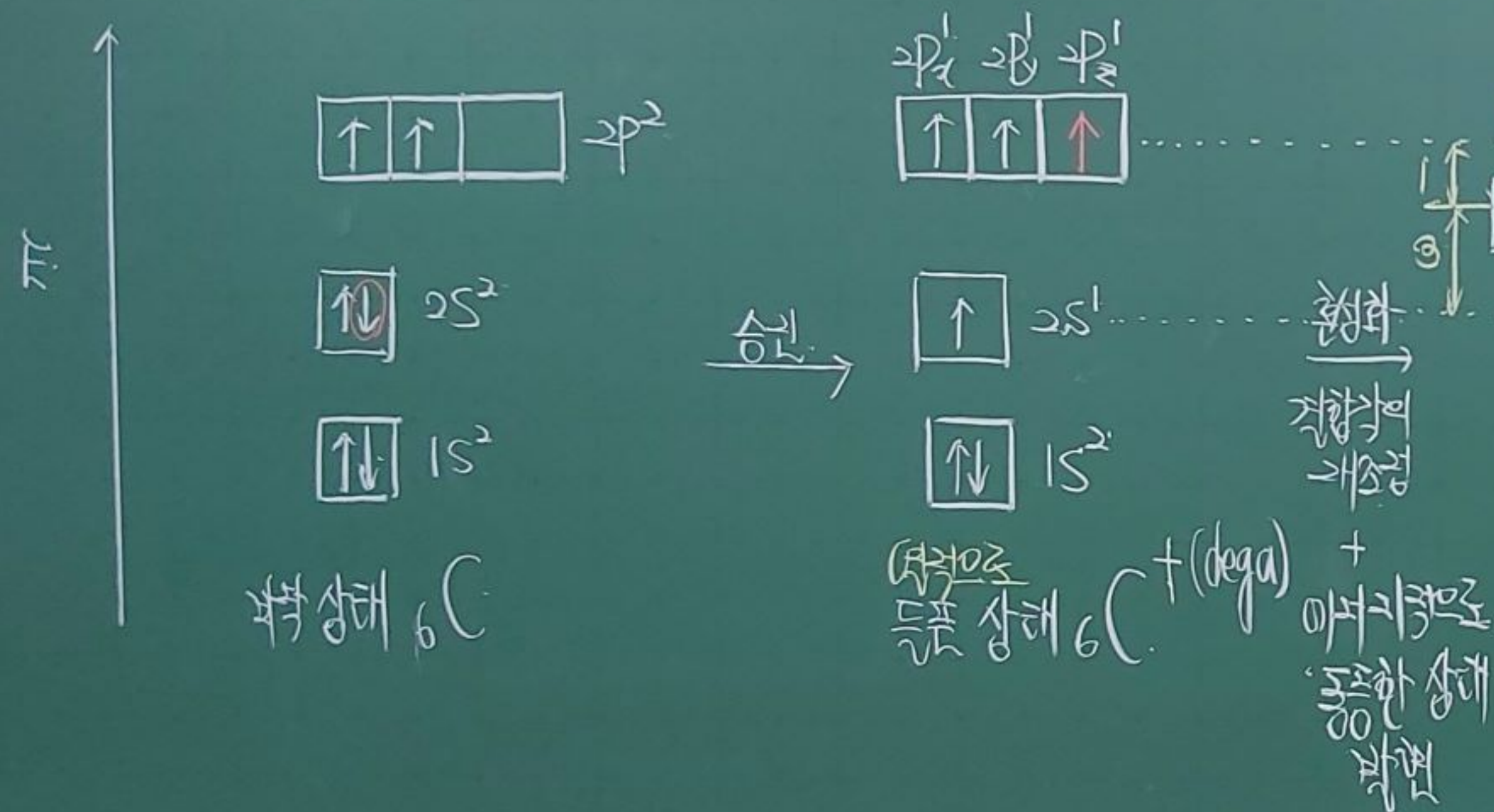


2) 중심 원자 (4개의 결합된 원자 계통수 이론) (원소 계통수 이론)

- 1) 바닥 상태 $\xrightarrow{\text{성명}}$ 들뜬 상태
 (혼 전자 수 = 2개) (혼 전자 수 = 4개가 됨)
 2) 들뜬 상태 (혼 전자 수 4개) $\xrightarrow{\text{혼합}}$ 중첩 4개 원자 계통수 계통수 (=예제)

② 대표적인 예 (포장력)

① sp^3 혼성 궤도함수 (= 하이브리드) (ex) CH_4 , CH_3-CH_3



(방향성 X) S 성분: $0.25 (25\%) = \frac{1}{4}$
 (방향성 O) P 성분: $0.75 (75\%) = \frac{3}{4}$

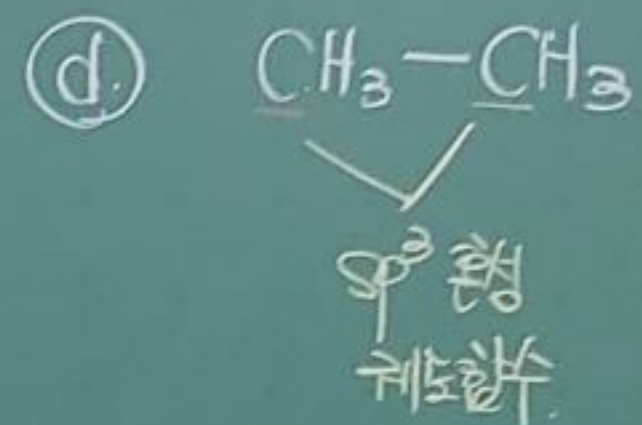
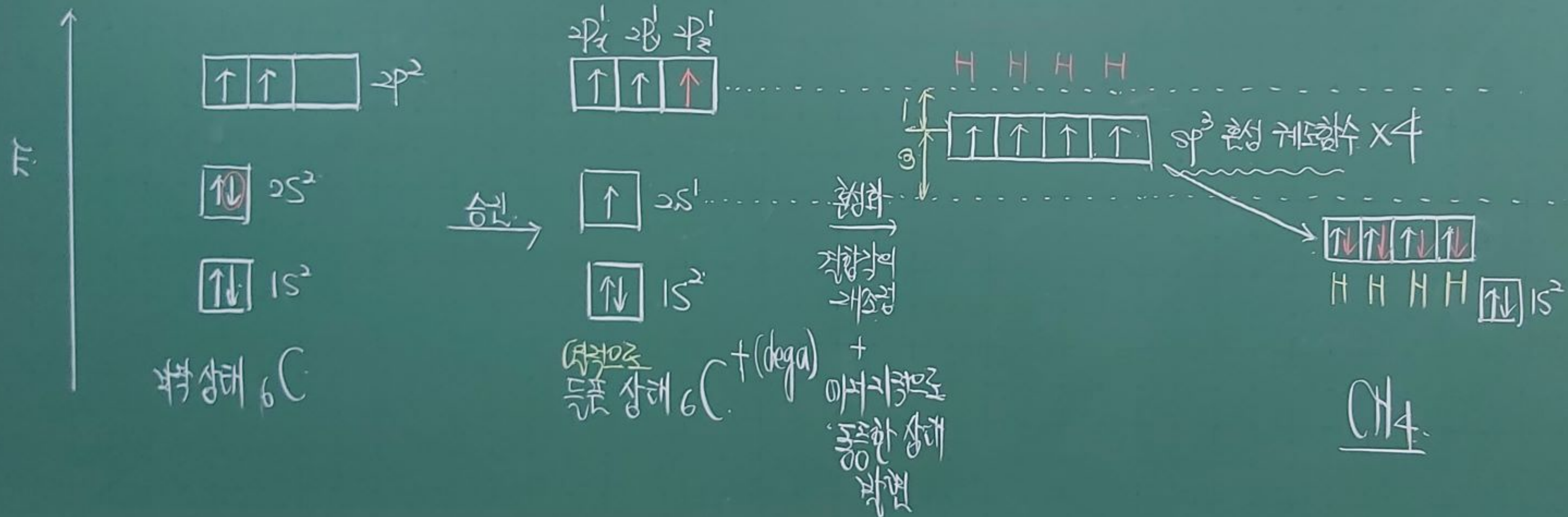
① 결합각 공식: $a^2 + b^2 = 1$, $\cos \theta = -\frac{a^2}{b^2} = -\frac{\frac{1}{4}}{\frac{3}{4}} = -\frac{1}{3} = -\frac{1}{3}$
 $\theta = 109.5^\circ$

② Orbital overlap diagram showing S and P orbitals.

③ 혼성 궤도함수 공식: $a^2 + b^2 = 1$

② 대표적인 예 (포괄적)

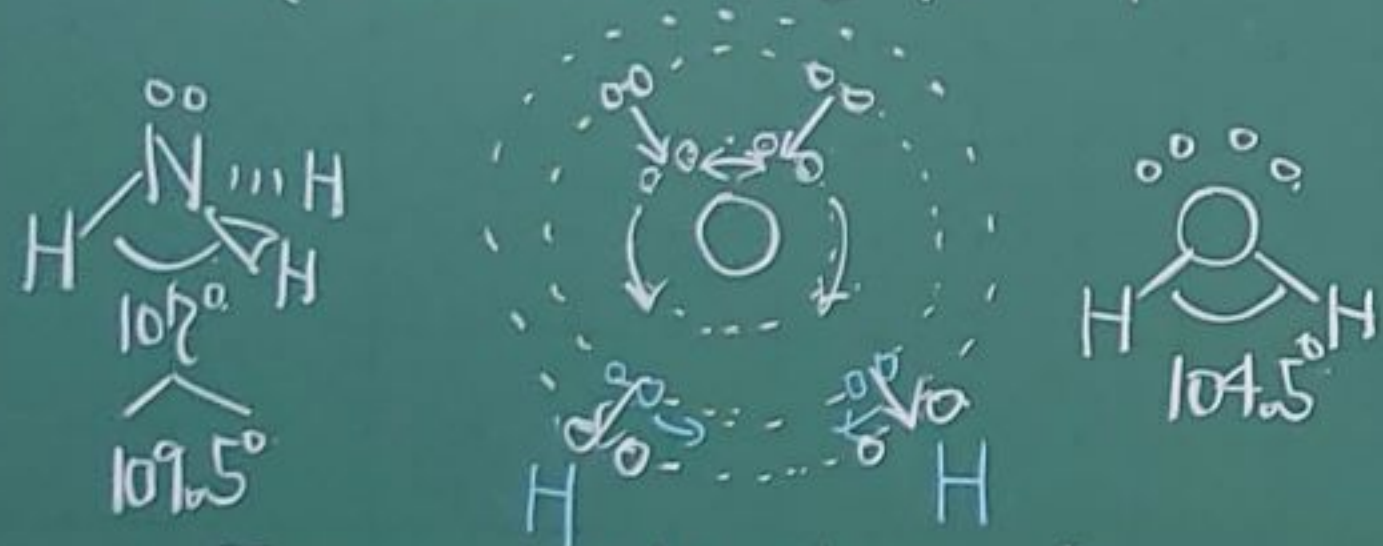
① sp^3 혼성 궤도함수 (= 하이브리드) (ex) CH_4 , CH_3-CH_3



② sp^3 혼성 궤도함수(=하이브리드)로 표현하는 예

1) SiH_4 (실리카기 가스), 입체수 = 4

2) $:NH_3$ (암모니아, 유사), 입체수 = 4



3) H_2O (물, 유사), 입체수 = 4

• 2개의 불쌍한 이종 원자쌍에 관여하는 혼성 궤도함수? 「미가추」

$\angle H-O-H = 104.5^\circ$, $\cos(104.5^\circ) = -0.25 = -\frac{1}{4} = -\frac{\frac{1}{5}}{\frac{4}{5}} = -\frac{a^2}{b^2}$

$s^{\frac{1}{5}}p^{\frac{4}{5}} = sp^4$ 혼성
 $\left\{ \begin{array}{l} s: 0.20(20\%) \\ p: 0.80(80\%) \end{array} \right\}$ vs. $\left\{ \begin{array}{l} s: 0.25(25\%) \\ p: 0.75(75\%) \end{array} \right\}$

• 2개의 불쌍한 이종 원자쌍에 관여하는 혼성 궤도함수? 「미가추」

r S의 성립 중 황률은 $= 1 = \frac{1}{5} + \frac{1}{5} + x + x$
 $\therefore x = 1 - \frac{2}{5} = \frac{3}{5}$, $x = \frac{3}{10} = 0.30(30\%)$

r $a'^2 + b'^2 = 1$
 $(0.30) \quad (0.70)$

$\uparrow$ p의 성립 황률 = 0.70 (70%) $\leftarrow$ $0.75(75\%)$

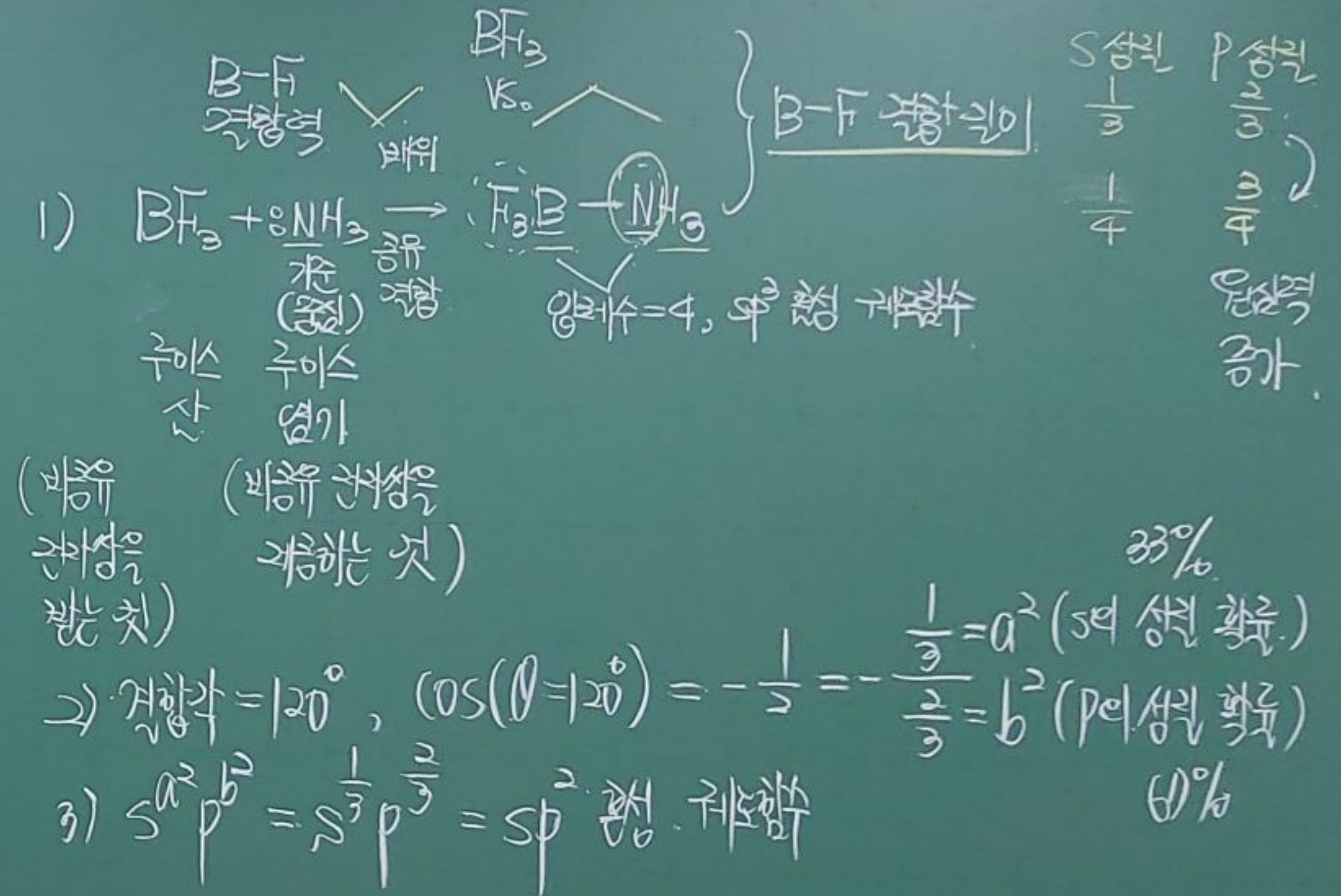
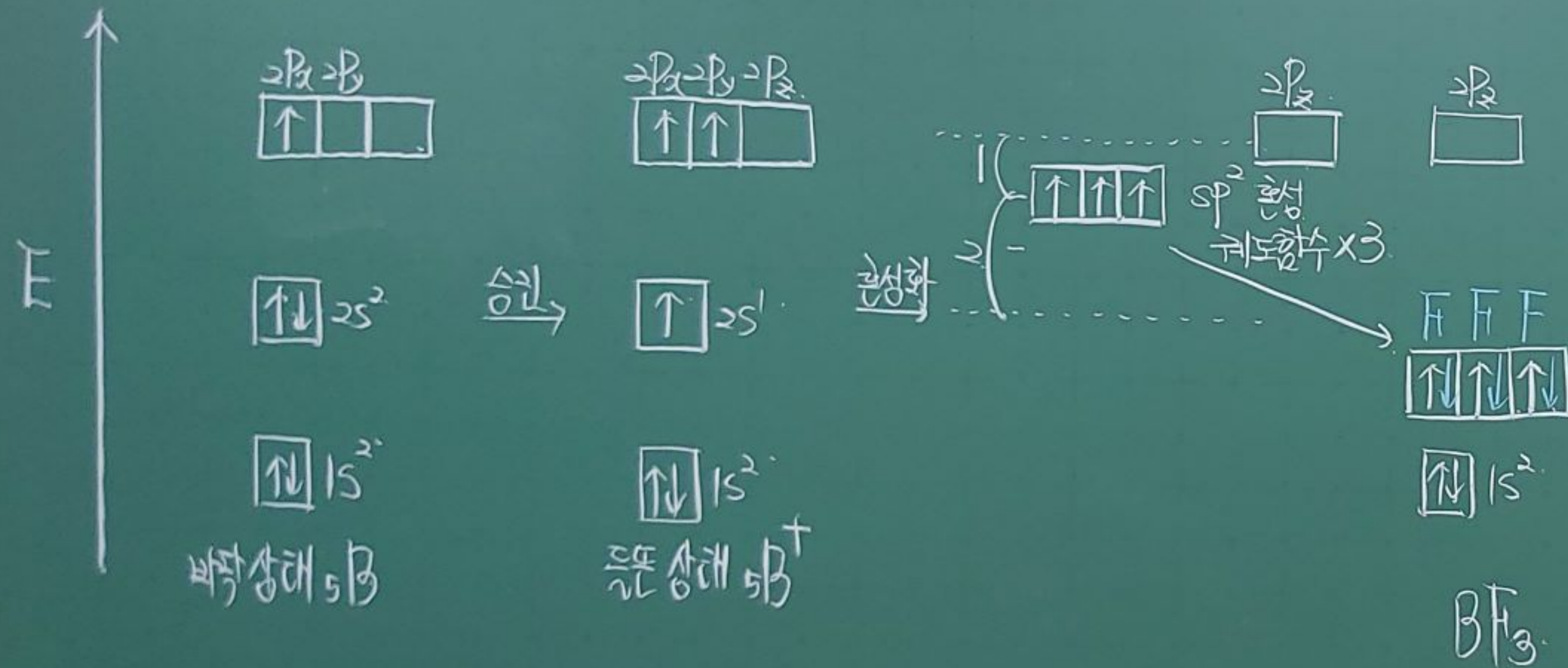
S의 성립 황률 $\uparrow$ sp^3
 vs. 0.25 (25%)

$s^{\frac{3}{10}}p^{\frac{7}{10}} = s^{\frac{3}{10}}p^{\frac{7}{10}} = sp^{\frac{7}{3}} = 2.33$

① sp^2 (+p) 혼성 궤도함수 (ex) $BF_3, BCl_3 / H_2C=CH_2$)

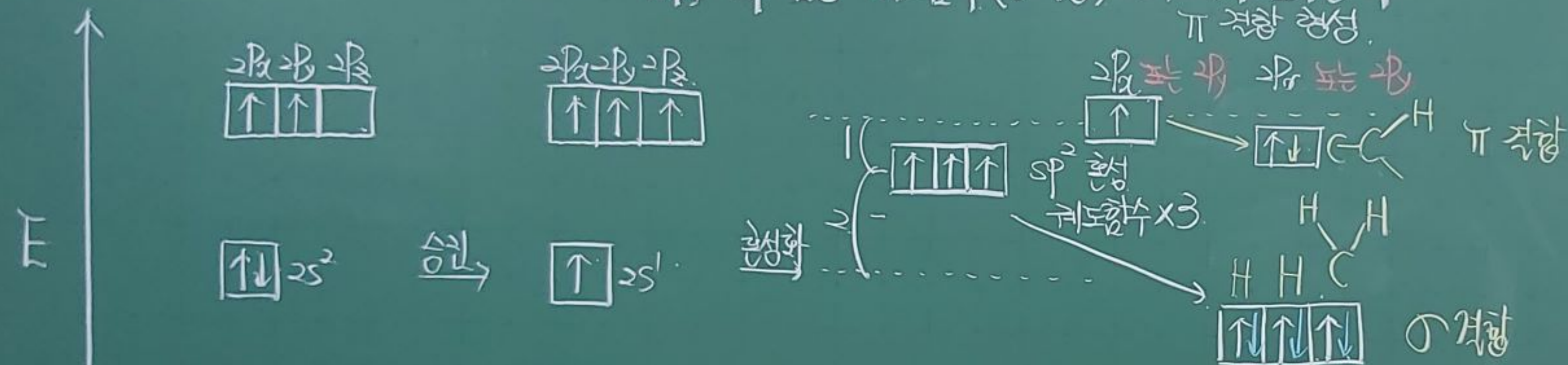
② BF_3, BCl_3 (MA_3 , 양자수=3)

양자수=3



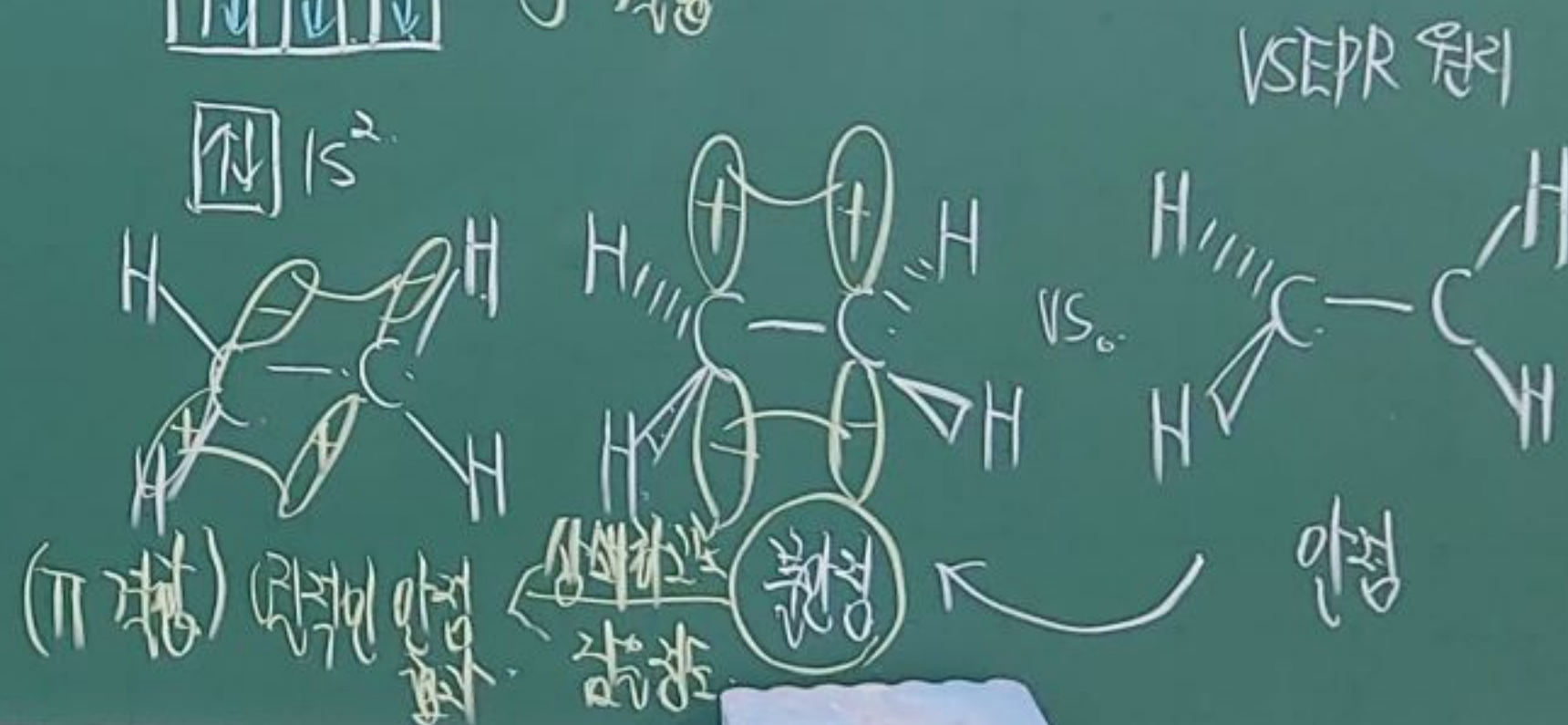
① sp^2 (+ p) 혼성 궤도함수 ($\propto$) $BF_3, BCl_3 / H_2C=CH_2$

② $H_2C=CH_2$ (양전자수=3) $\uparrow$ $\times$ 양전자수=3
 대략 sp^2 혼성 궤도함수 (σ 결합) + p 궤도함수간의 π 결합 형성.



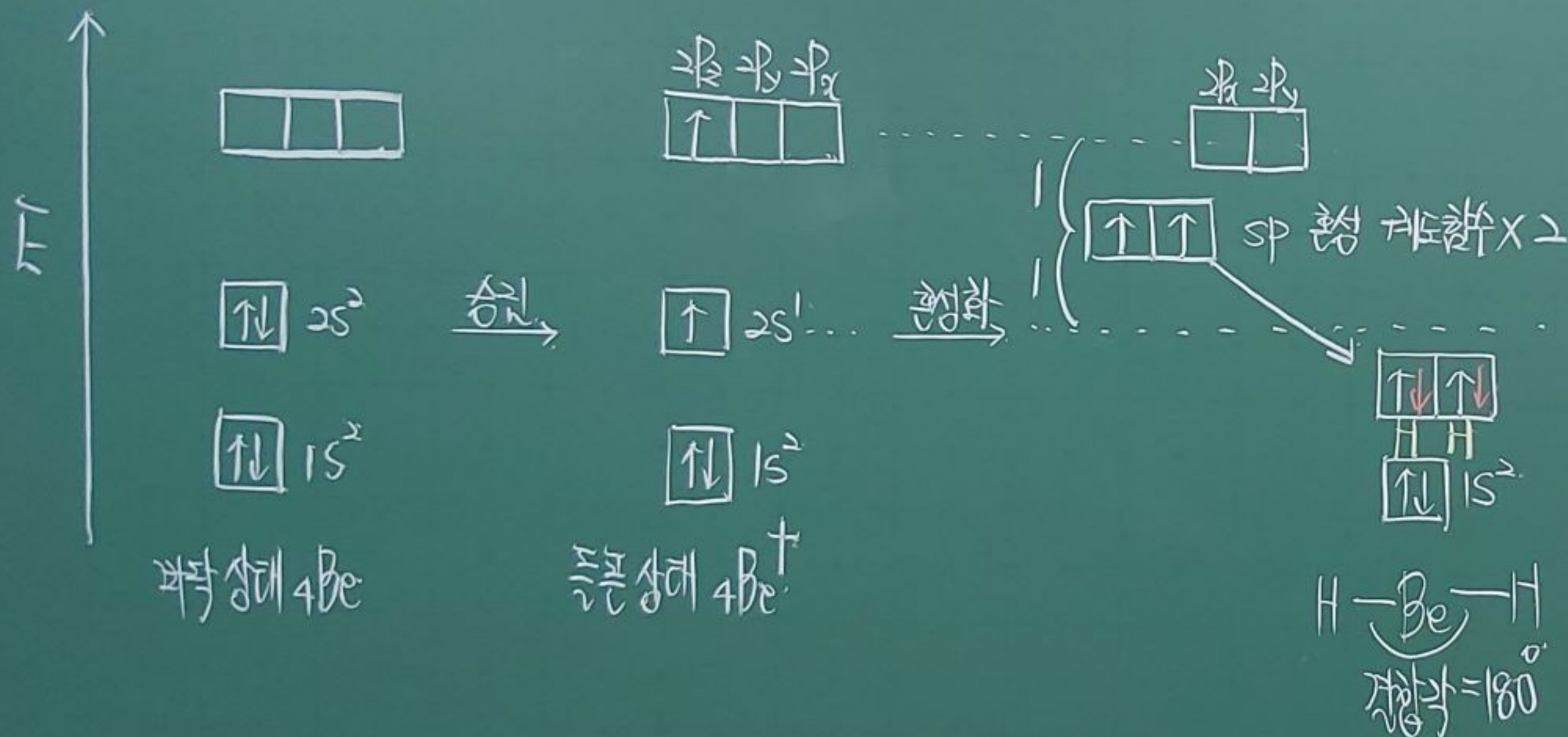
$1s^2$
바닥상태 6C

$1s^2$
바닥상태 6C⁺



① sp (+2개 p 궤도함수) 혼성 궤도함수 (ex) $BeH_2, BeF_2 / H-C \equiv C-H / O \equiv O$ ($\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}$)

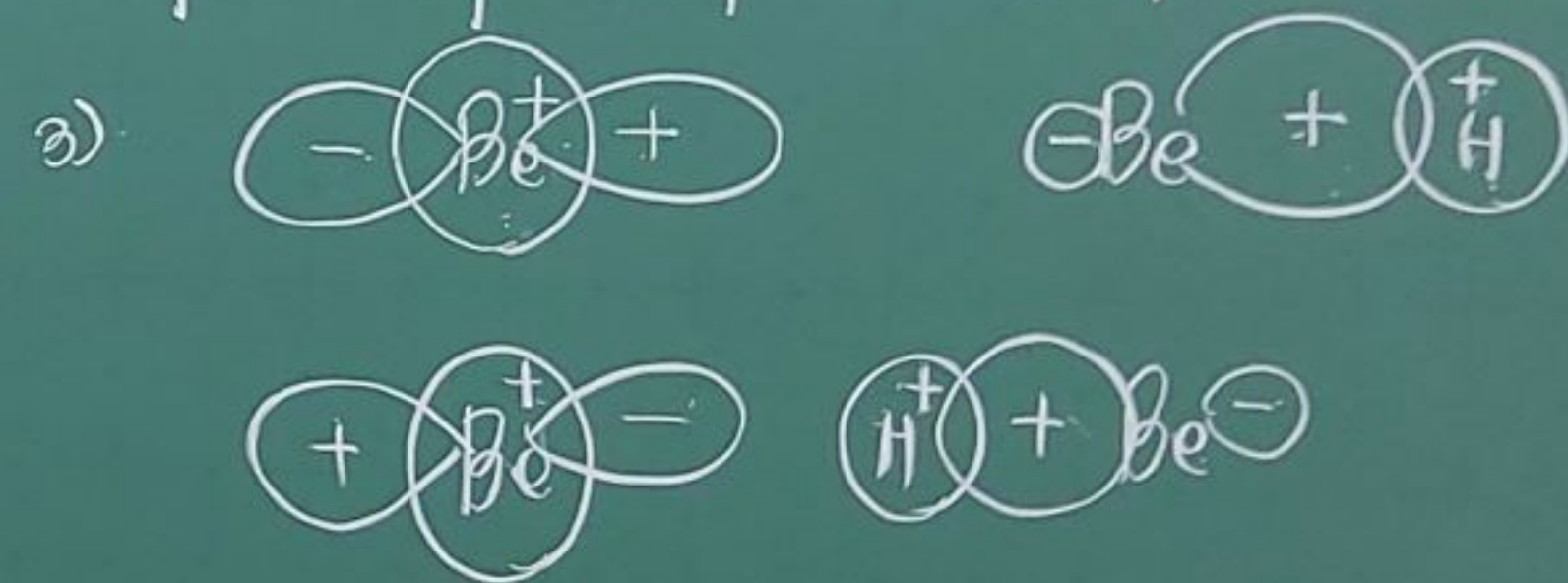
② BeH_2, BeF_2 (혼성수=2)

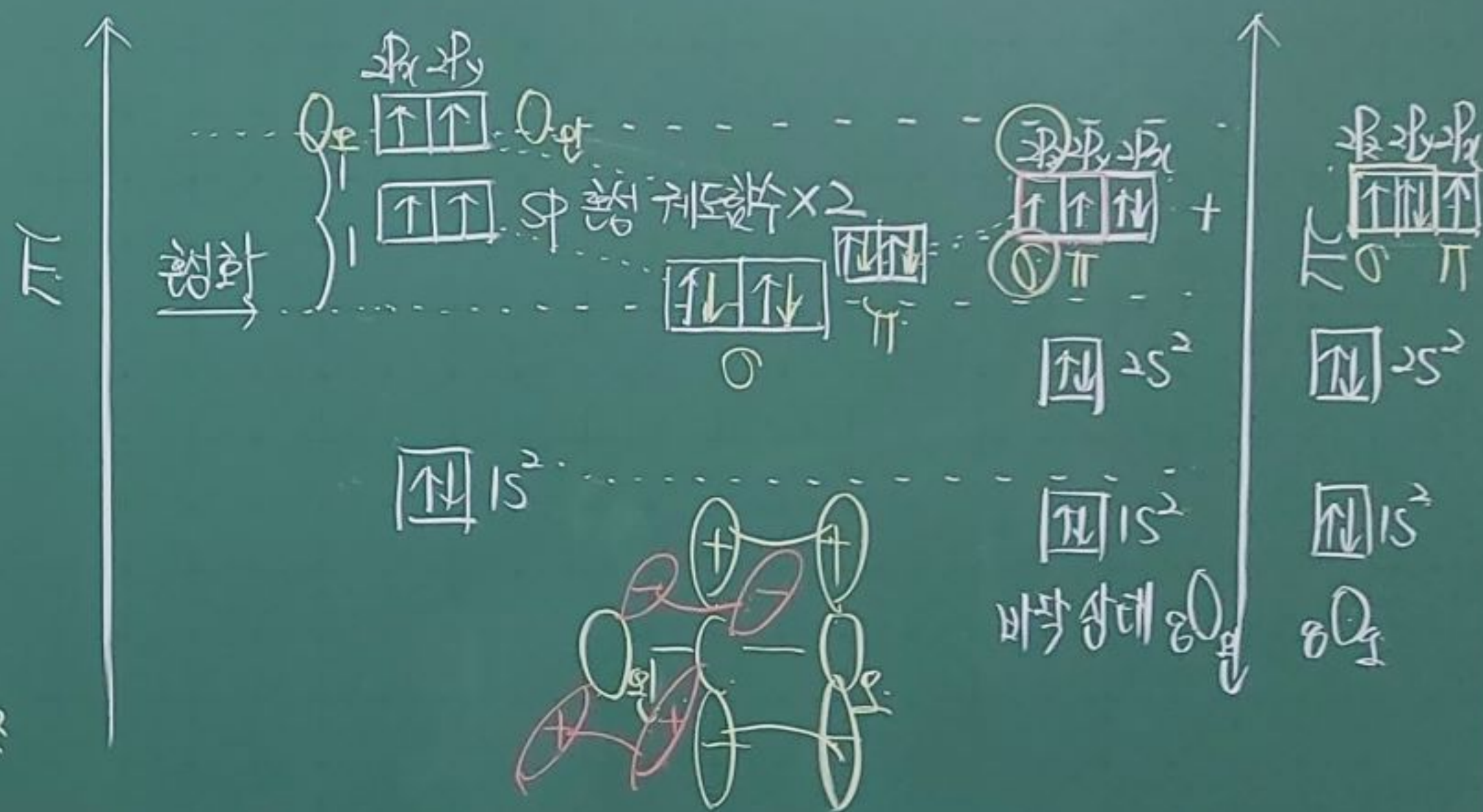
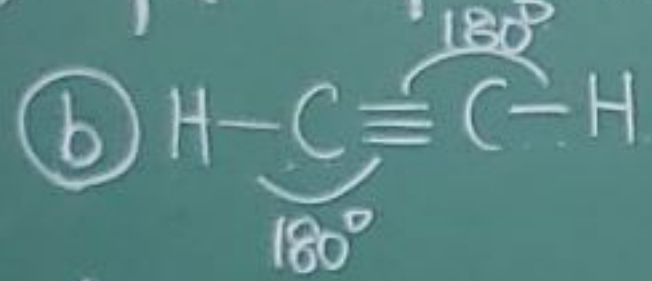


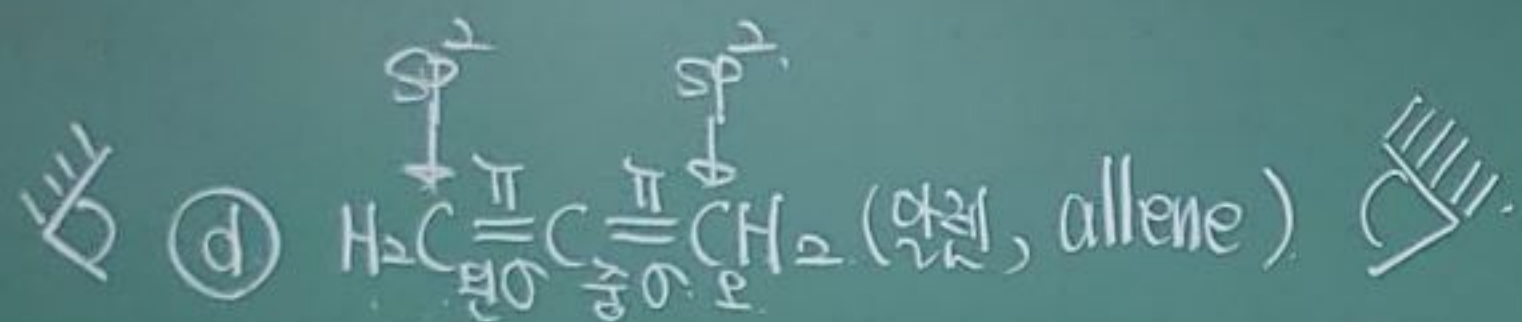
1) 결합각 = 180°

$$\cos(\theta = 180^\circ) = -1 = -\frac{1}{1} = -\frac{\frac{1}{2} = a^2}{\frac{1}{2} = b^2}$$

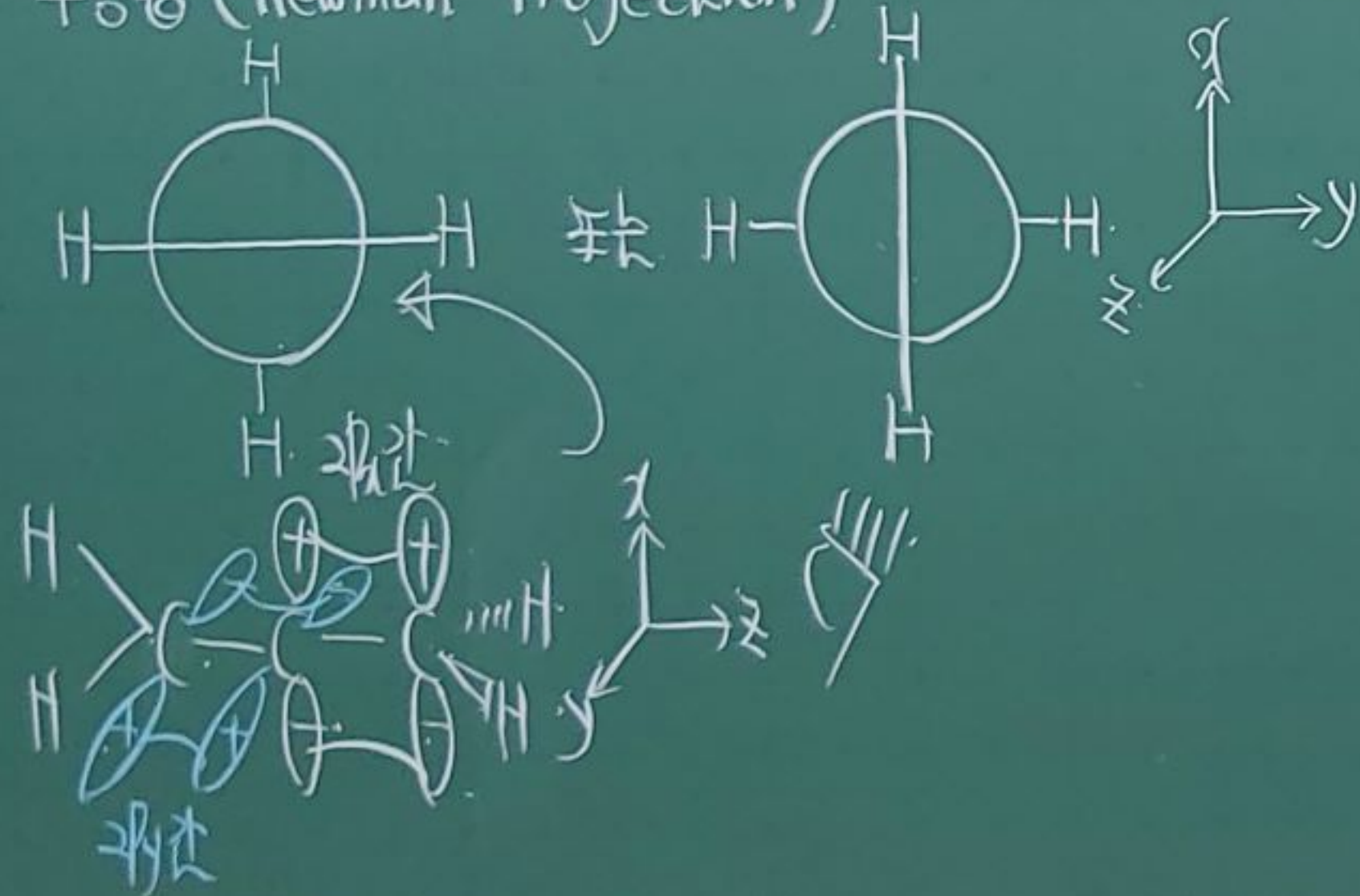
$$\Rightarrow \frac{a^2}{b^2} = \frac{1}{1} = 1 \Rightarrow a = b \Rightarrow sp \text{ 혼성 궤도함수}$$



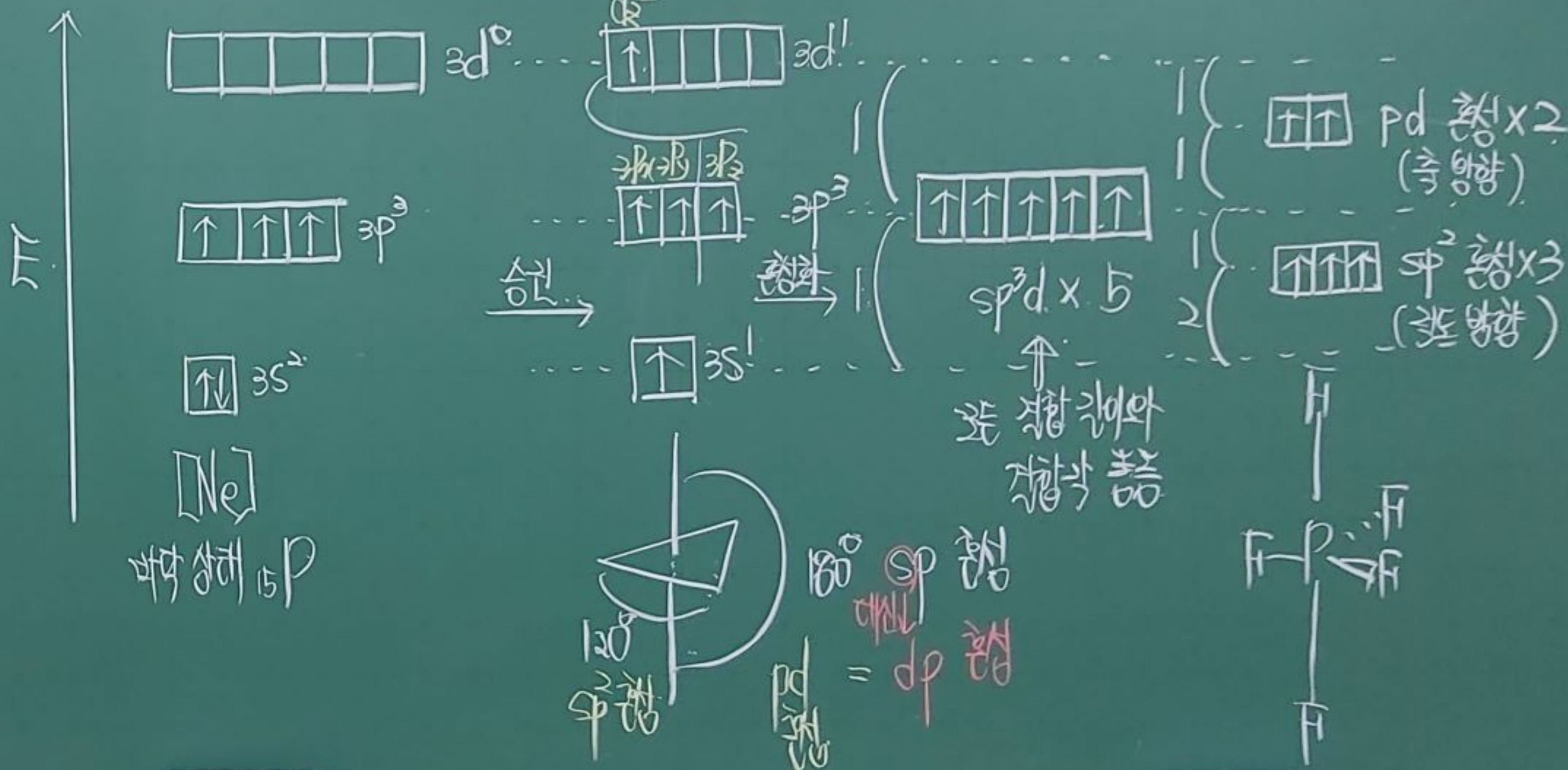




- 1) C중: sp 혼성 궤도함수 (양자수=2)
- 2) C원자 C중: p 혼성 궤도함수 (양자수=3)
- 3) 뉴만 투영법 (Newman Projection)



⑤ sp^3d 혼성 궤도함수 (예: PF_5 , SF_6 , ClF_3 , IF_5), 양자수=5, Bent의 규칙 만족.



S성인 증가
전환율 증가

② $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2} (= \frac{1}{4})$ 로 가리운 양의 경우.

① $\cos \theta = -\frac{a^2}{b^2}$, $0^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ - sp 혼성 궤도함수
 (sp 성분 = 0.50 (50%))
 혼성 궤도함수에
 최댓값.

중립 원자에서 p성전환 S 성전이
 되기 $\Leftarrow$ 존재 있음. (순환 원자 계도함수)
 양자 전이
 빛 비추기 전이 존재.

⑥ NH_3 vs $\left(\begin{array}{ccc} \text{PH}_3 & \text{AsH}_3 & \text{SbH}_3 \\ 93.2^\circ & 92.1^\circ & 91.6^\circ \end{array} \right) \Rightarrow$ NH_3 is a Lewis base, while the others are Lewis acids.

H_2O vs. H_2S H_2Se H_2Te
 104.5° 92.1° 90.6° 90.2°

