

선형 행렬 $\begin{pmatrix} \text{원자의} \\ \text{원자 계도함수들의} \\ \text{전자 구름 결합} \end{pmatrix}$

추가 위상 개편 $\rightarrow \left. \begin{array}{l} \text{상대 간섭 (공간적성)} \\ \text{---} \\ \text{복합 간섭 (시간성)} \end{array} \right\} \text{등이 바뀌면}$

$$\Rightarrow \underset{\text{가장}}{\text{이유}} \underset{\text{가장}}{\text{적합}} \text{형성 (선택형)} A + A \xrightleftharpoons{\text{가장}} A_2$$
$$A + A \xrightarrow[\text{中间过程}]{\text{碰撞}} A_2$$

↓ 변형된 수

$\left\{ \begin{array}{l} \text{순환 영가 계통수} \\ \downarrow \text{승진} + \text{형성} \\ \text{형 계통수} \end{array} \right.$

$\left. \begin{array}{l} \text{한글한글} \text{ 문자 개조함수} \\ \text{한글한글} \text{ 문자 개조함수} \end{array} \right\} \text{한글한글}$
 $\text{한글한글} \text{ 문자 개조함수} \quad \text{한글한글}$

(2) MDT의 시작

① ② 분자의 라미널 성질

⑦ 주사: 장가삼, 주사수 = 274

④ 예제 : $\overset{\circ}{\underset{\circ}{O}} = \overset{\circ}{\underset{\circ}{O}} \quad \swarrow = \mu_{\text{쌍(반쌍)}} - 1$

$$\text{O}_2 \quad \text{O}=\text{O} \quad \mu = \sqrt{n(n+2)} \text{ B.M.}$$
$$\Rightarrow V_{BT} \text{ 예측} (\frac{\text{총 관측수}}{2} = 0.1)$$

판각기성

기온 이른 생평 X.

$$= \sqrt{8} \text{ B.M.}$$

↓ 반목림

223

② 새로운 경험 이론 계단 (MOT 계단)
(행위 변화)

③ O_2 분자의 분자 궤도함수 표현하기 (P.101 상판)

① O_2 분자의 MO 도표 (P. 44)

② O_2 분자의 총 전자수 = $8 \times 2 = 16e^-$

③ 파울리 배타 원리의 전자 배치에 관한

작은 원리, 파울리 배타 원리, Hund 규칙은

그대로 적용 $\Rightarrow$ 분자의 바닥 상태 전자 배치

$$\text{④ 결합 차수} = \frac{\text{결합성 분자 궤도함수의 전자수} - \text{반결합성 분자 궤도함수의 전자수}}{2} = \frac{10 - 6}{2} = 2$$

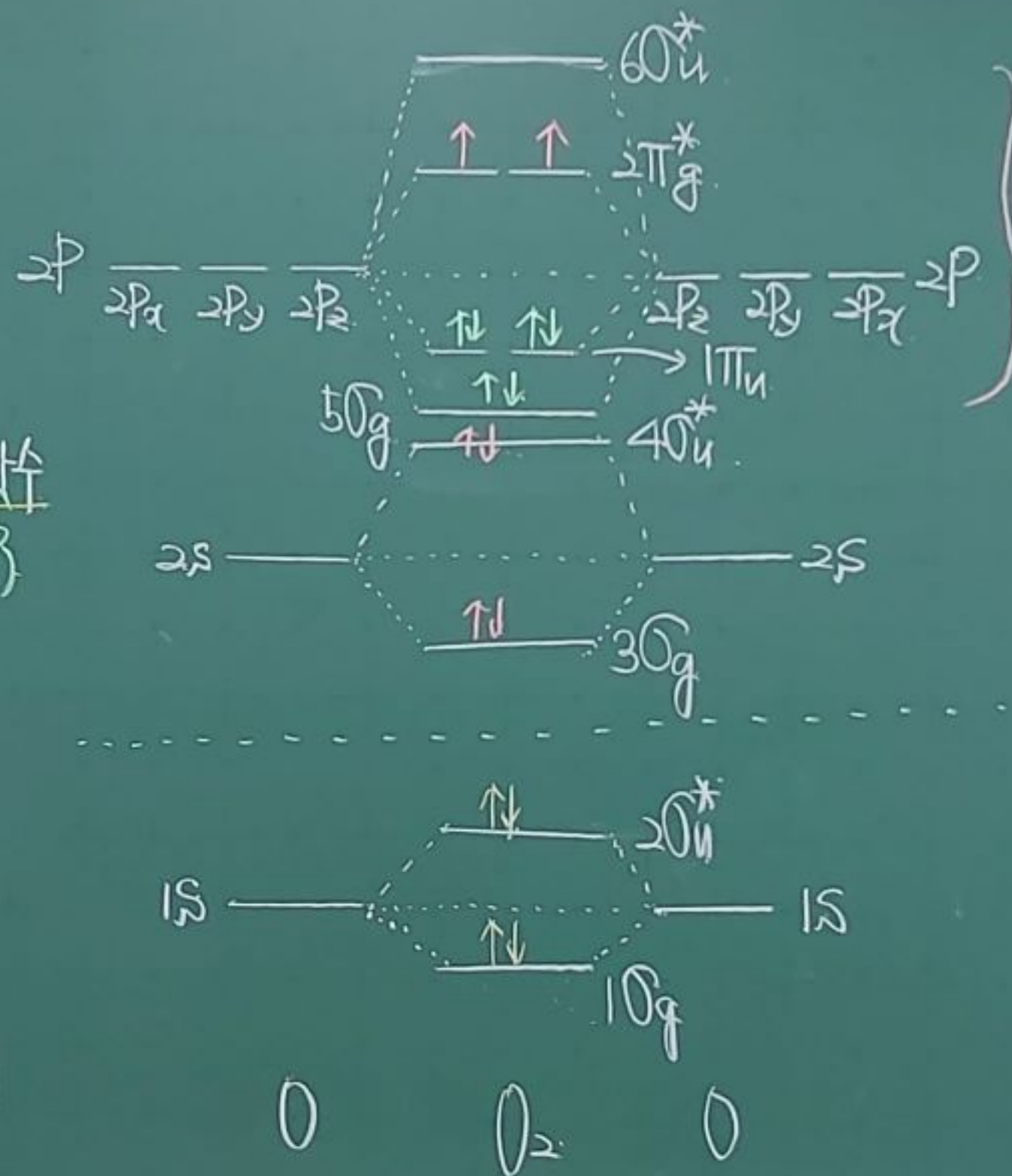
① B.O.가 '0'인 경우: 분자로는 존재할 수 없음.

② B.O.가 '0'보다 큰 값인 경우: 존재함!

③ 자기적 성질: $\mu = \sqrt{n(n+2)} \mu_B$, $n = \text{홀 전자 수}$

④ $O_2^+, O_2, O_2^-, O_2^{2-}$ 전자 비교 (O_2 분자 궤도함수 도표 이용)

④ O_2 분자의 MO 도표



	O_2^+	O_2	O_2^-	O_2^{2-}	
	$\uparrow$	$\uparrow \uparrow$	$\uparrow \uparrow \downarrow$	$\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow$	$\uparrow \downarrow$
B.O.	2.5	2.0	1.5	1.0	> 0

부원공으로
가득 채워진
전자 궤도함수

증가 ← 결합 에너지

가장 작은 상 상 상 반

	O_2	O_2^-	F_2	F_2^-	Ne_2
	$\uparrow \uparrow$	$\uparrow \uparrow \downarrow$	$\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow$	$\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow$	$\uparrow \uparrow \downarrow \downarrow$
B.O.	2.0	1.5	1.0	0.5	0 (존재 X)

증가 ← 결합 세기 (에너지)

가장 작은 상 상 반 상

(3) 결합성 분자 계도함수와 반결합성 분자 계도함수

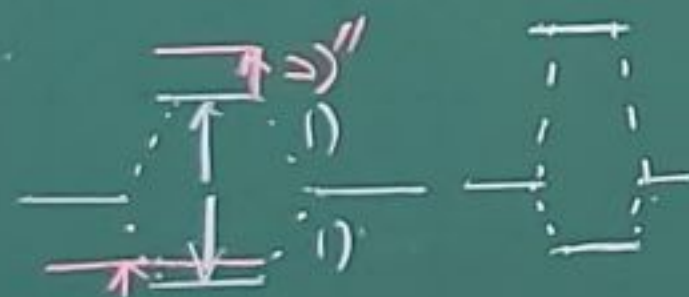
① 양자 역학 도입

- ① 진폭이 매우 작음. 동시에 파장을 가짐.
(입자성) (λ)

∴ 드 브로이 식 $\lambda = \frac{h}{p}$ 선형 운동량
 $= \frac{h}{mv}$ $\downarrow \uparrow$
 큰 v (e) $\downarrow$ $\uparrow$ 매우 큰 λ

- ② 대상(e)이 속박된 계 속에 존재

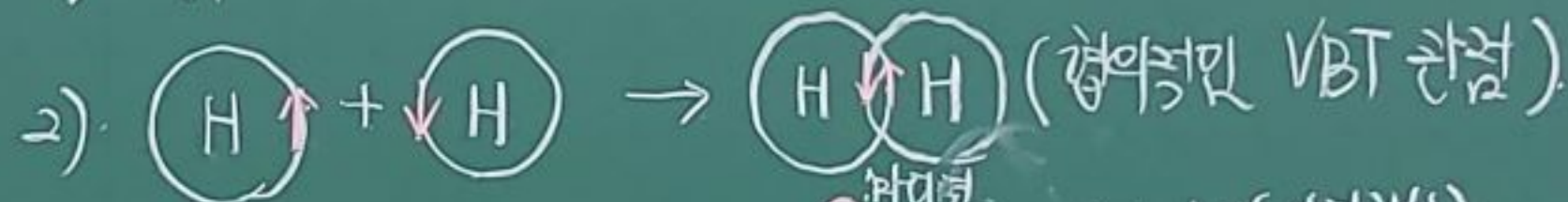
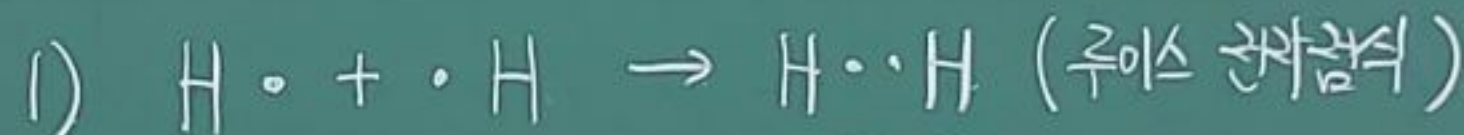
- ③ H_2^+ 에 적용 (쉬운 사례)



② 원자 계도함수를 이용해서 분자 계도함수를 형성

- ① 선형 조합 이용 (위상을 고려)

- ② 도상적 표현 (H_2 형성 또는 해리)



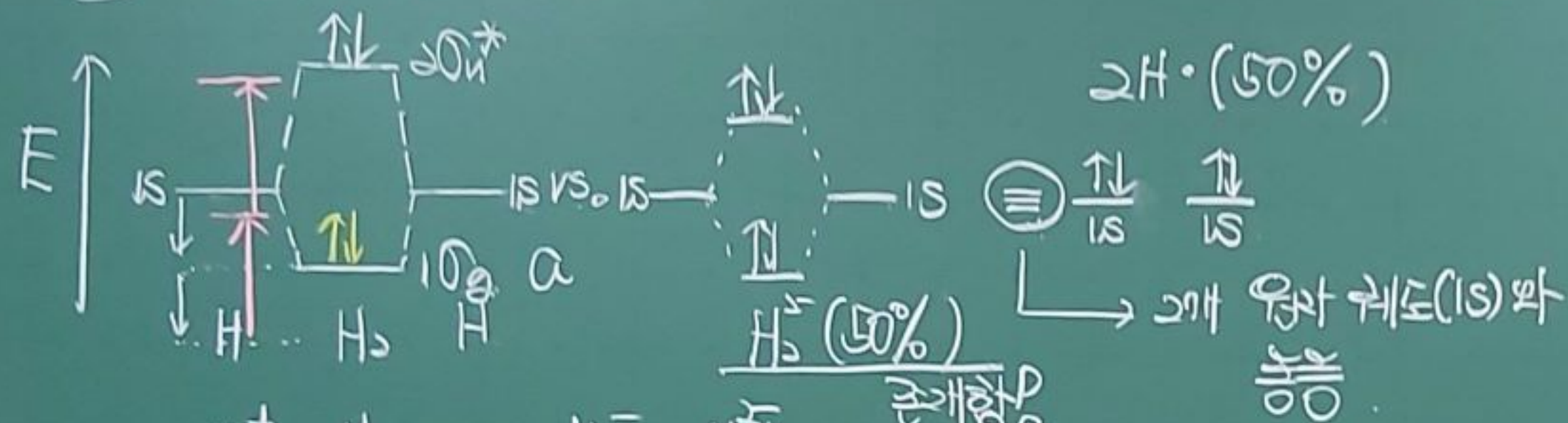
③ |결합의 안정성| < |반결합의 불안정성|

- 1) 동등 두 행 사이에 두 행의 바깥쪽에서
 $\text{전자} = \text{전자}$
 $\downarrow$

결합 형성 결합 해리

- 2) 차이 $\rightarrow$ 가라앉아 두 행의 바깥에서 $\rightarrow$ 가라앉아 두 행의 바깥에서
 두 행의 바깥에서 두 행의 바깥에서
 $\left\{ \begin{array}{l} \text{가라앉아 두 행의 바깥에서} \\ \text{최소한 상대의 두 행의 바깥에서} \end{array} \right.$

② 결합 차수 (Bond Order) = 0

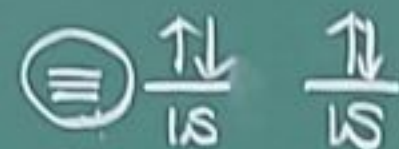


	H_2^+	H_2	H_2^-	H_2^{2-}
B.O.	0.5	$\frac{2-0}{2} = 1.0$	0.5	0
	—	—	↑	↑↓
	↑	↑↓	↑↓	↑↓

동등(B.O.)
 결합세기 ($H_2^+ > H_2$)
 결합길이 ($H_2^+ < H_2$)

← 순회 순회 X

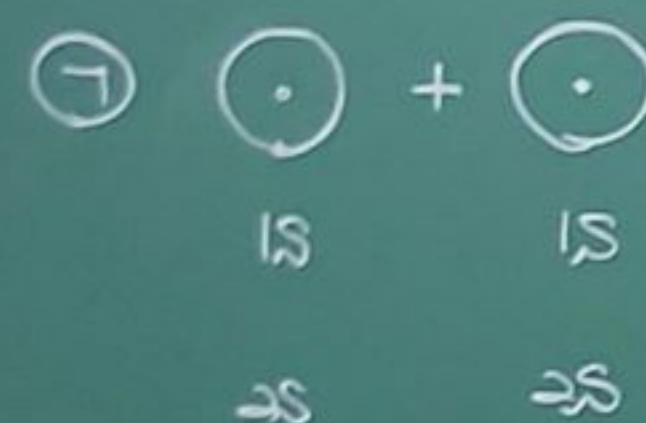
$2H \cdot (50\%)$



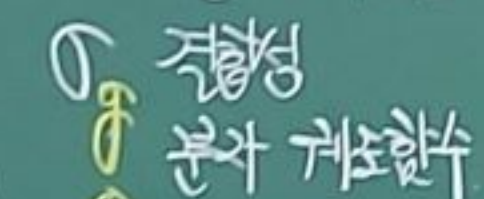
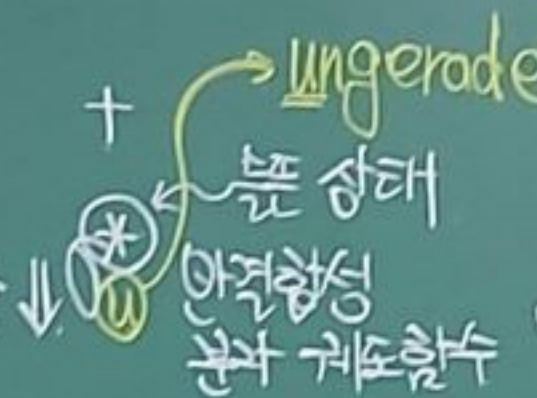
이와 유사 궤도(1s)와 동등

(4) 분자 궤도함수의 종류

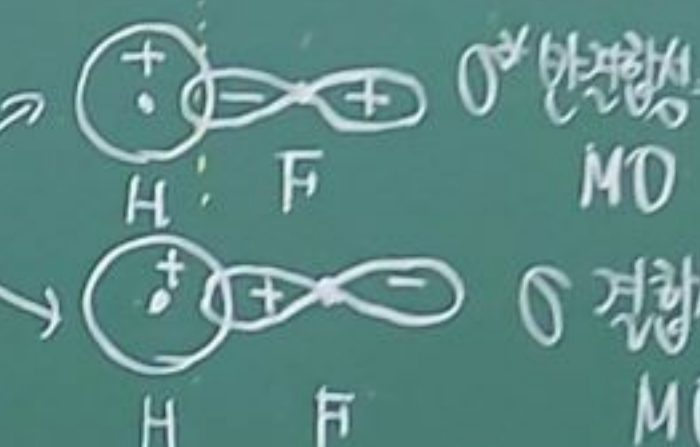
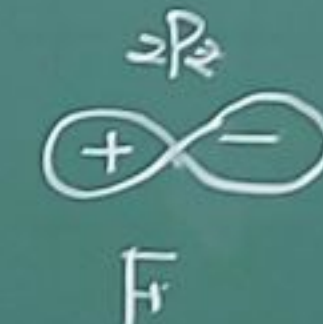
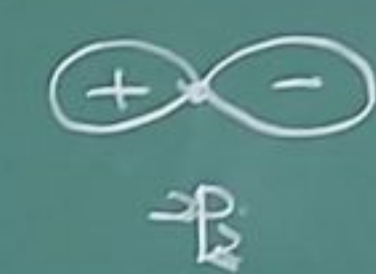
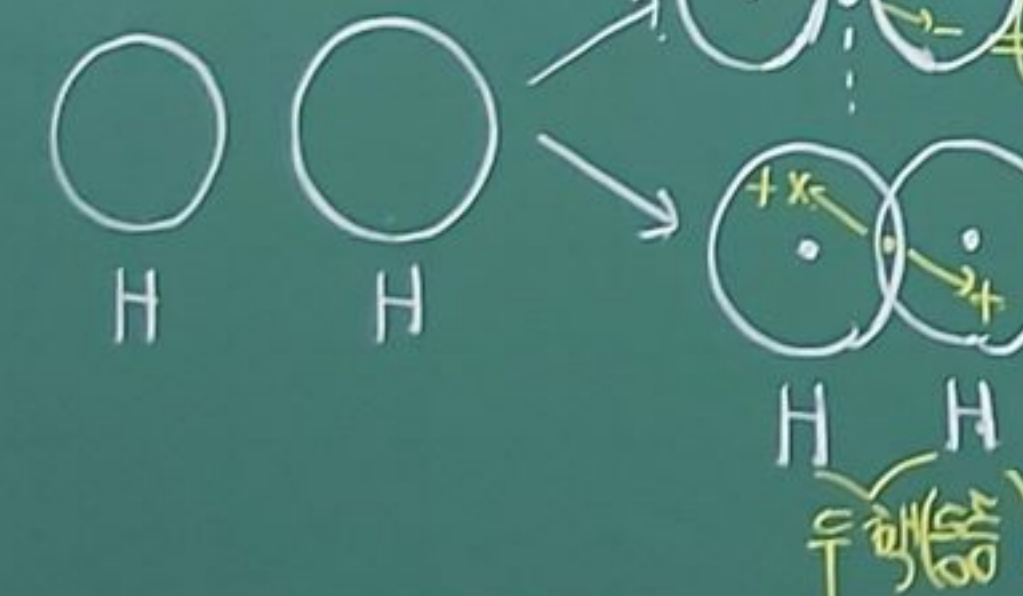
① 시그마(σ) 분자 궤도함수



기존 공간 ↓
 기존 공간 ↑

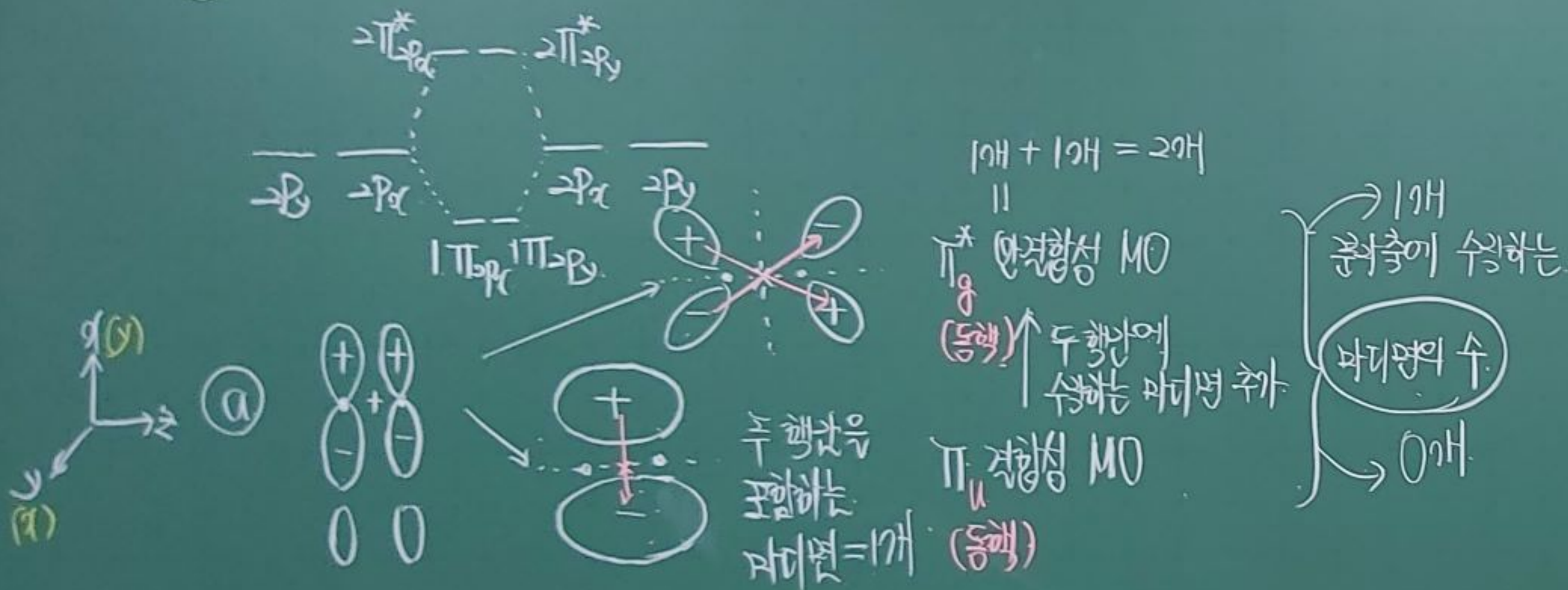


두 원자 궤도함수에
 수직하는 마디면이
 1개 추가



마디면의 수 = 3

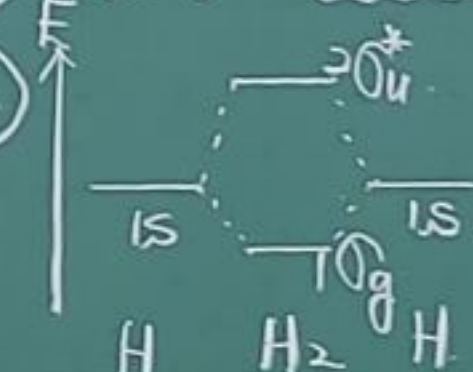
① 파이 (π) 분자 궤도함수



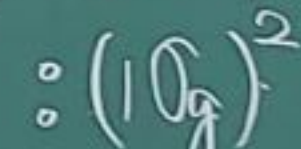
(5) 동행 고분자의 MO 도표 예

① H_2 분자 도표 이론

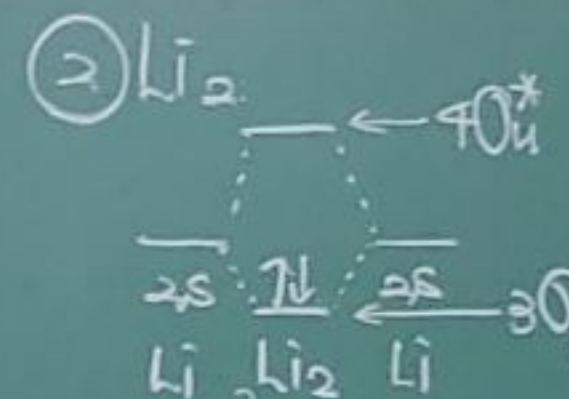
② 기온도: O_2 분자의 MO 도표



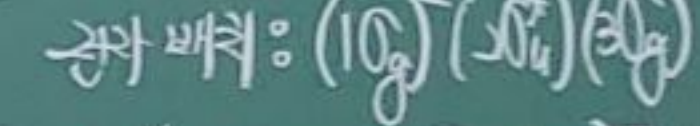
③ H_2 분자의 바닥 상태 전자 배치



	H_2^+	H_2	H_2^-	H_2^{2-}	He_2	He_2^+
B.O.	0.5	1.0	0.5	0	0	0.5
존재 여부	○	○	○	X	X	○
→ 결합 세기	$H_2 > H_2^+ > H_2^-$					
→ 결합 길이	$H_2 < H_2^+ < H_2^-$					



④ Li_2 분자의 바닥 상태 전자 배치



⑤ Li_2^+ , Li_2 , Li_2^- , Li_2^{2-}

B.O.	0.5	1.0	0.5	0
존재 여부	○	○	○	X

결합 세기: $Li_2 > Li_2^+ > Li_2^-$

결합 길이: $Li_2 < Li_2^+ < Li_2^-$

⑥ Be_2 의 바닥 상태 전자 배치

