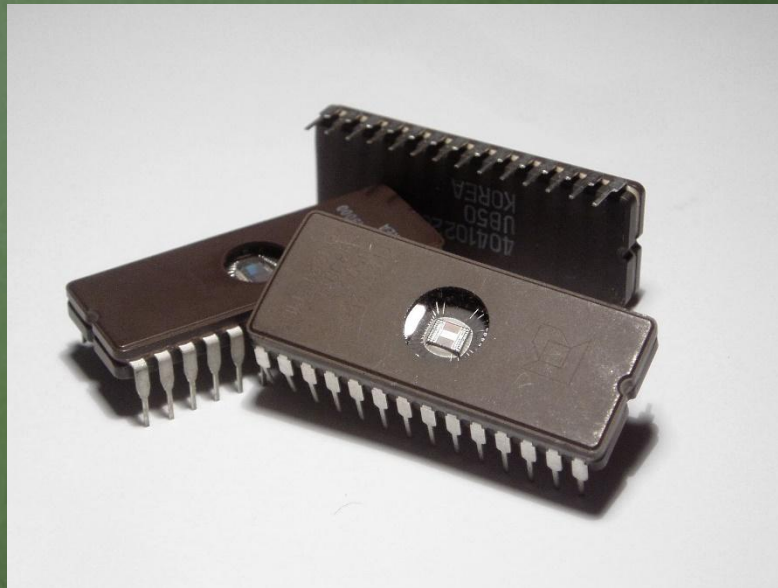
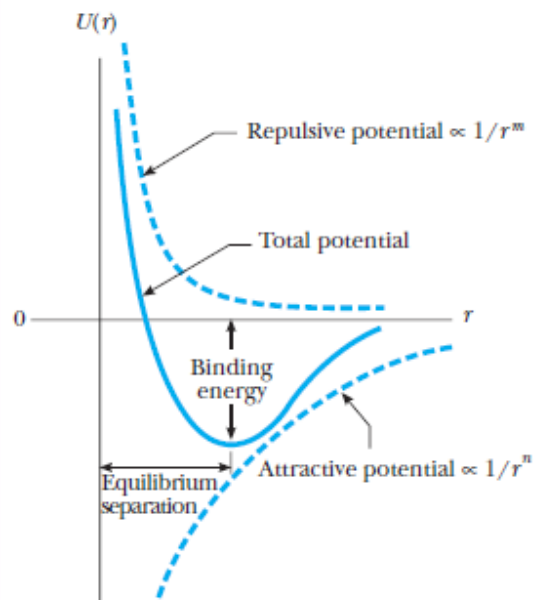


11장 분자 구조 / 12장 고체 상태



원자들이 모여서 분자를 구성한다.
분자들의 결합을 구성하는 원리는
양자역학으로부터 주어진다.

분자 결합



$$U = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}$$

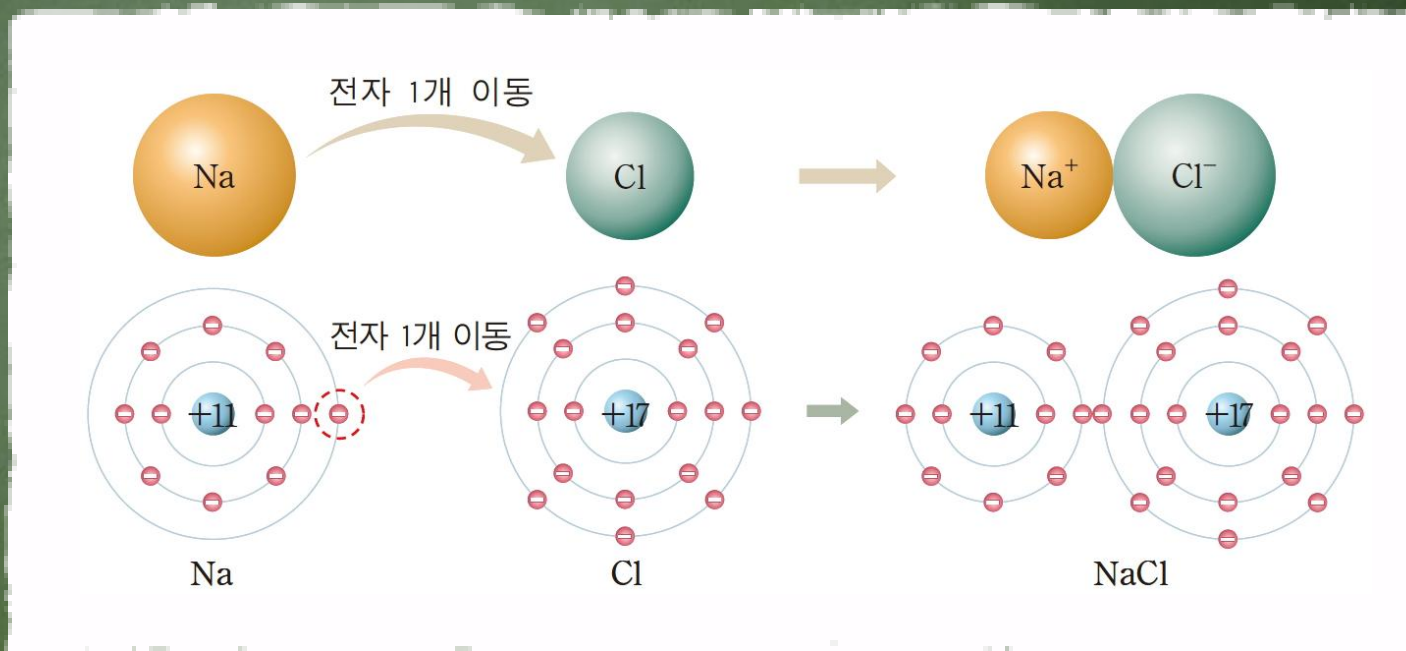
분자간의 결합은 위와 같은 퍼텐셜 에너지에 의해
표현된다.

분자 결합의 종류

- 이온 결합 ionic bond
- 공유 결합 covalent bond
- 금속 결합 metallic bond
- 반데르발스 결합 van der waals bond
- 수소 결합 Hydrogen bond

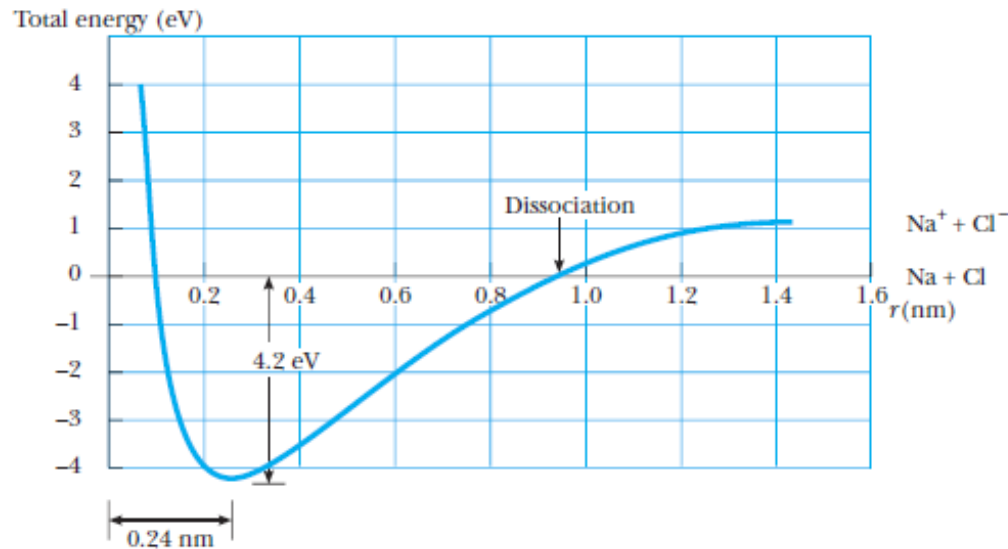
...

이온 결합



이온 결합이란 한 개 또는 그 이상의 전자가 하나의 원자에서 다른 원자로 이동하는 방법으로 이루어진 결합을 말한다.

이온 결합



이온 결합이란 한 개 또는 그 이상의 전자가 하나의 원자에서 다른 원자로 이동하는 방법으로 이루어진 결합을 말한다.

이온 결합 고체

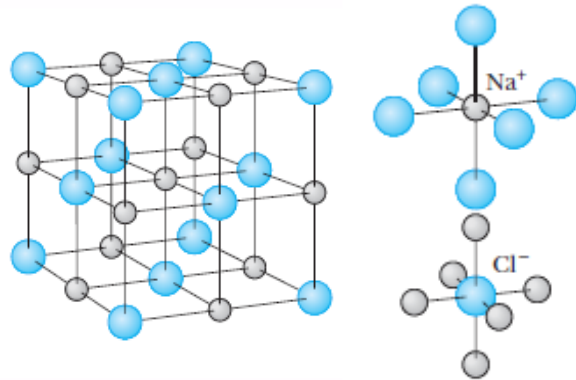
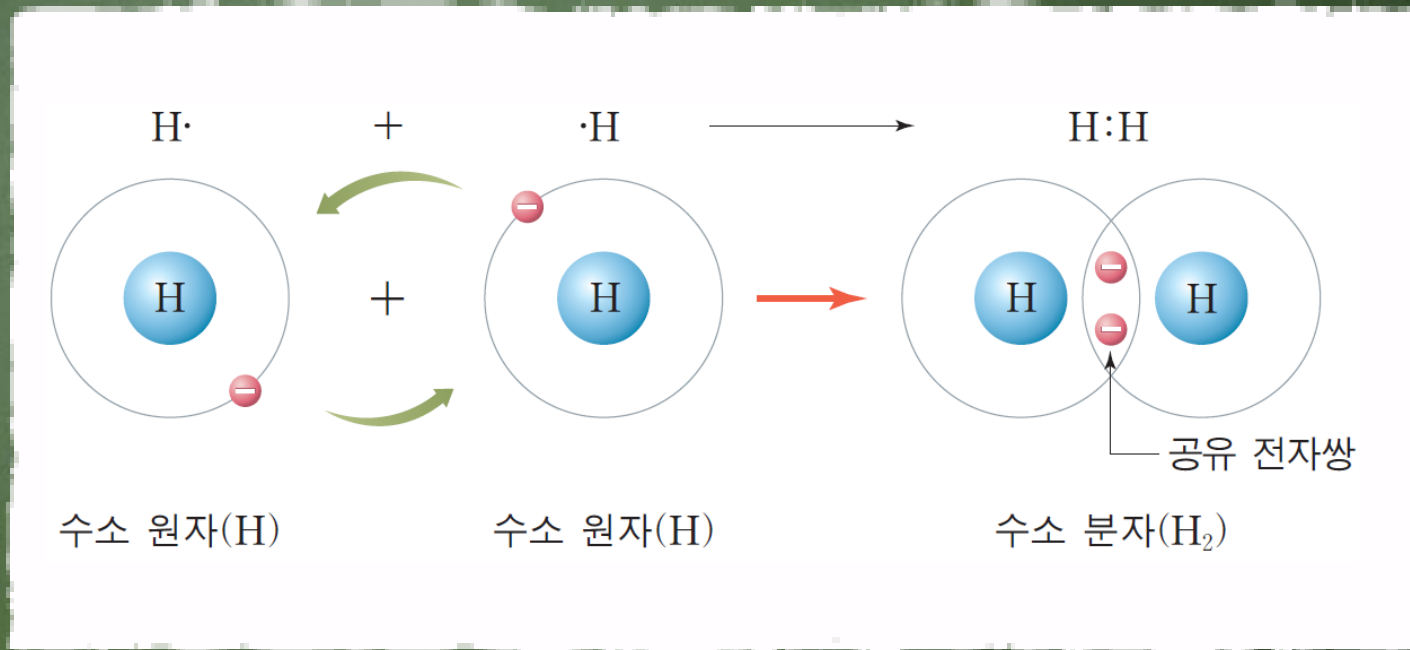


Table 12.1 Properties of Some Ionic Crystals

Crystal	Equilibrium Separation (Å)	Atomic Cohesive Energy (eV per atom pair)	Melting Point (K)
LiF	2.01	8.32	1143
NaCl	2.82	6.31	1074
RbF	2.82	7.10	1068
KCl	3.15	6.48	1043
CsI	3.95	5.36	621

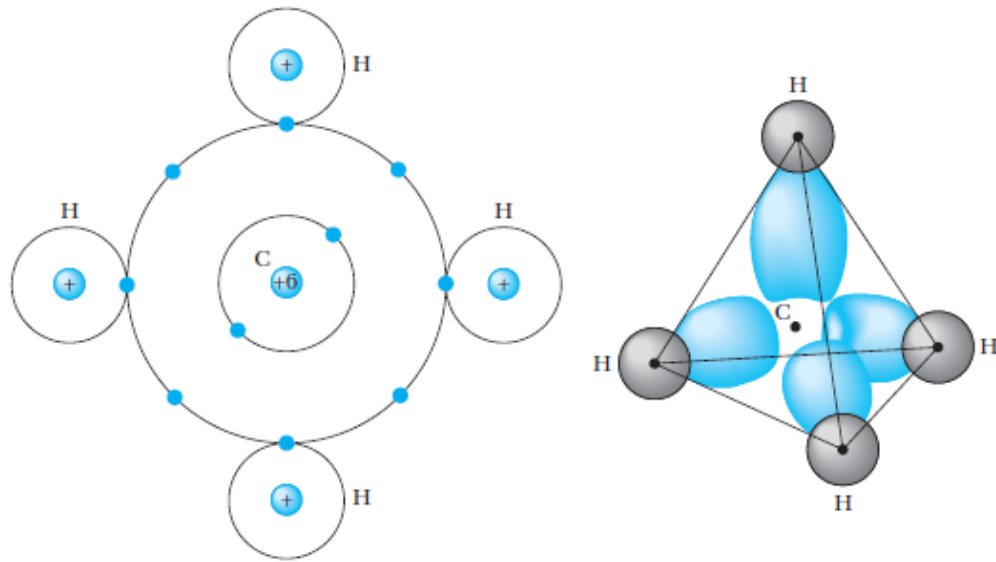
이온 결합이 만들어내는 고체 구조는 안정적이고 단단하지만 낮은 전기 전도성을 가진다.

공유 결합



공유 결합이란 한쪽 또는 양쪽 원자로부터 제공받은 전자를 두 개의 원자가 공유하는 결합을 말한다.

공유 결합



공유 결합이란 한쪽 또는 양쪽 원자로부터 제공받은 전자를 두 개의 원자가 공유하는 결합을 말한다.

공유 결합 고체

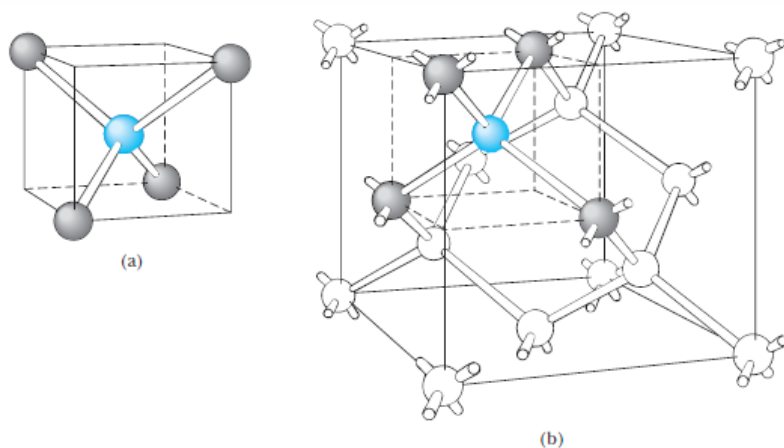


Table 12.2 Properties of Some Covalent Crystals

Crystal	Atomic Cohesive Energy (eV/atom)*	Melting Point (K)
C (diamond)	7.37	~4000
SiC	6.15	2870
Si	4.63	1687
Ge	3.85	1211

공유 결합이 만들어내는 고체는 매우 단단하며 전자들을
뜰뜰 상태로 만들기 위해 높은 에너지의 빛을 주어야 하므로
대체로 투명하다.

금속 결합 고체

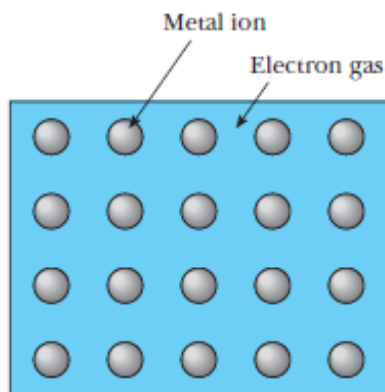


Table 12.3 Properties of Some Metallic Crystals

Crystal	Atomic Cohesive Energy (eV/atom)*	Melting Point (K)
Fe	4.28	2082
Cu	3.49	1631
Au	3.81	1338
Ag	2.95	1235
Pb	2.04	874
Zn	1.35	693

금속 결합은 양이온과 격자 주변의 자유전자 기체들 사이의 인력에 의해 이루어진 결합이다.

금속 결합 고체

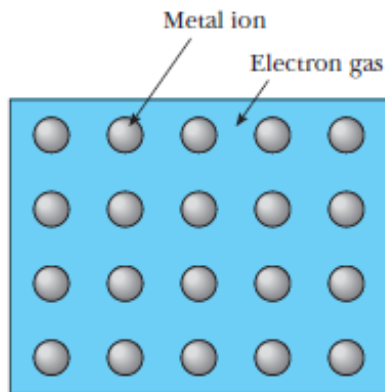
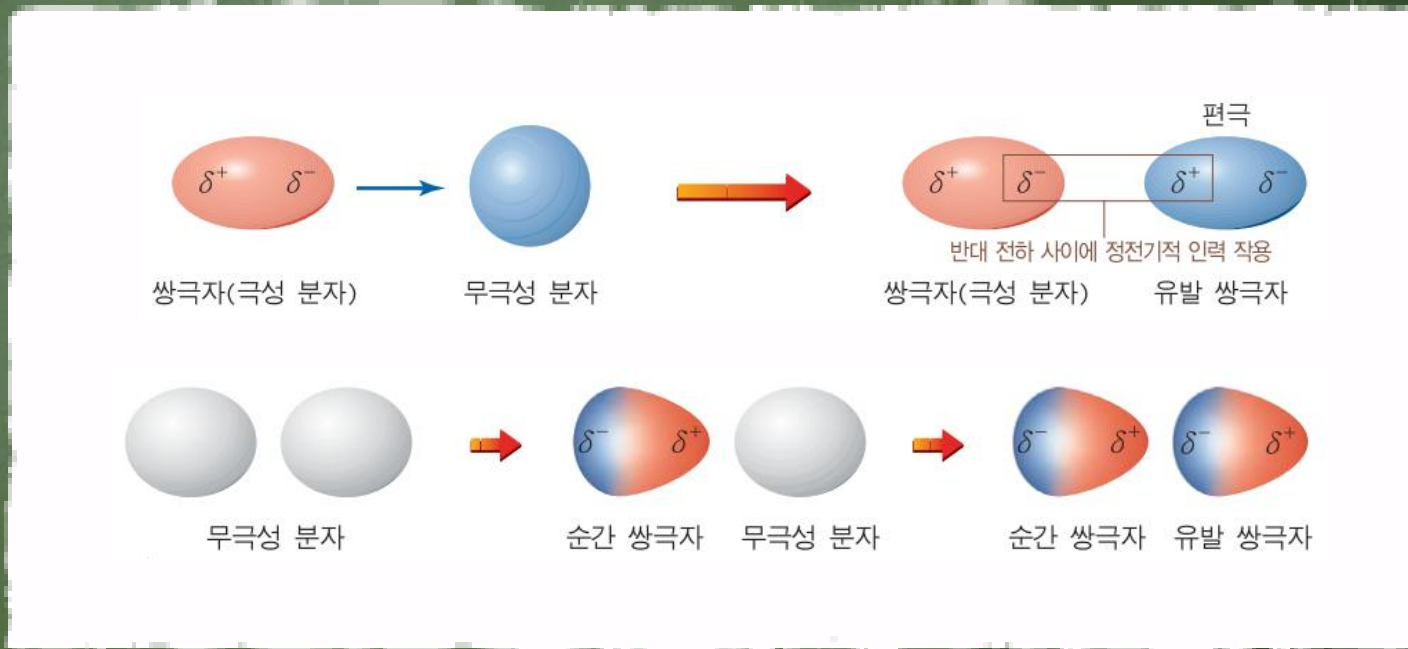


Table 12.3 Properties of Some Metallic Crystals

Crystal	Atomic Cohesive Energy (eV/atom)*	Melting Point (K)
Fe	4.28	2082
Cu	3.49	1631
Au	3.81	1338
Ag	2.95	1235
Pb	2.04	874
Zn	1.35	693

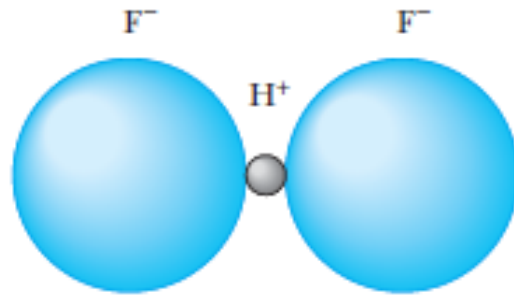
금속 결합이 만들어내는 고체는 이온 결합이나 공유 결합보다는 약하지만, 전체적으로 많은 수의 자유 전자가 존재하므로 높은 전기 전도성을 보인다.

반데르발스 결합



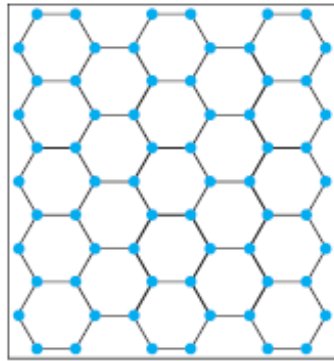
반데르발스 결합이란 쌍극자-쌍극자/쌍극자-유발 쌍극자, 또는 전하 요동에 의한 쌍극자간의 인력을 말한다.

수소 결합

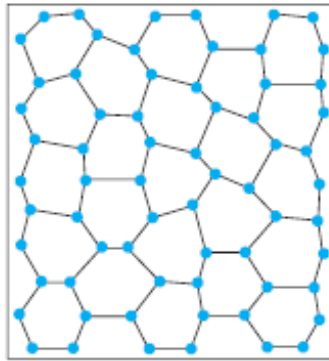


수소 결합이라는 약한 강도의 결합은 음이온 사이에서 수소 원자의 양성자에 의한 결합을 말한다.

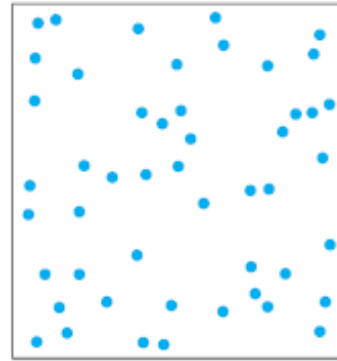
분자 결합점



Crystal



Glass



Gas

반데르발스 힘은 또는 수소 결합은 전자가 관여하지 않는
분자간 결합에 영향을 미친다.

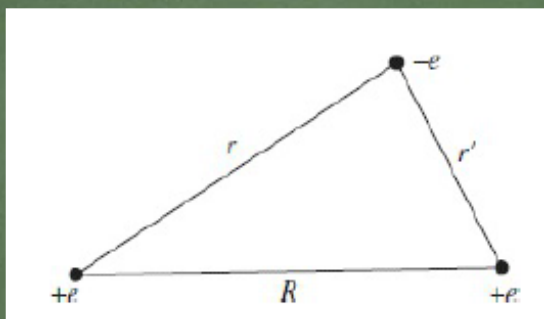
이러한 분자간 결합을
양자역학의 방법을 통해
설명하는 몇 가지 간단한 예를
살펴보자.

변분 원리

임의의 규격화된 파동 함수 $|\psi\rangle$ 를 사용해
해밀토니안의 기대값이 가장 작게 된다면,
그것이 바로 바닥 상태의 고유 함수가 된다.

슈뢰딩거 방정식을 직접 풀기 어려울 때,
변분 원리는 바닥 상태의 파동함수를
구체적으로 계산할 수 있는
아주 좋은 근사적 기법이 된다.

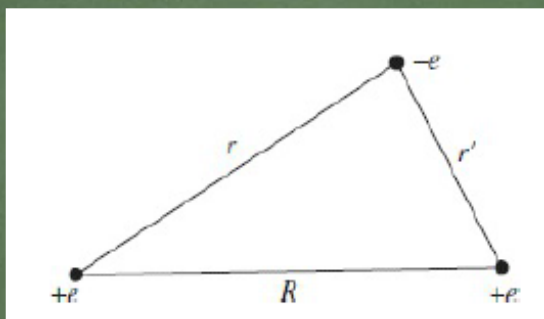
수소 분자 이온



$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r'} \right)$$

두 원자 핵 사이에 전자가 있을 때,
우리는 각각의 양성자가 전자에 미치는 퍼텐셜을
고려해야 한다.

수소 분자 이온



$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r'} \right)$$

$$\psi = A[\psi_0(r) + \psi_0(r')]$$

각각의 양성자에 대한 파동함수를

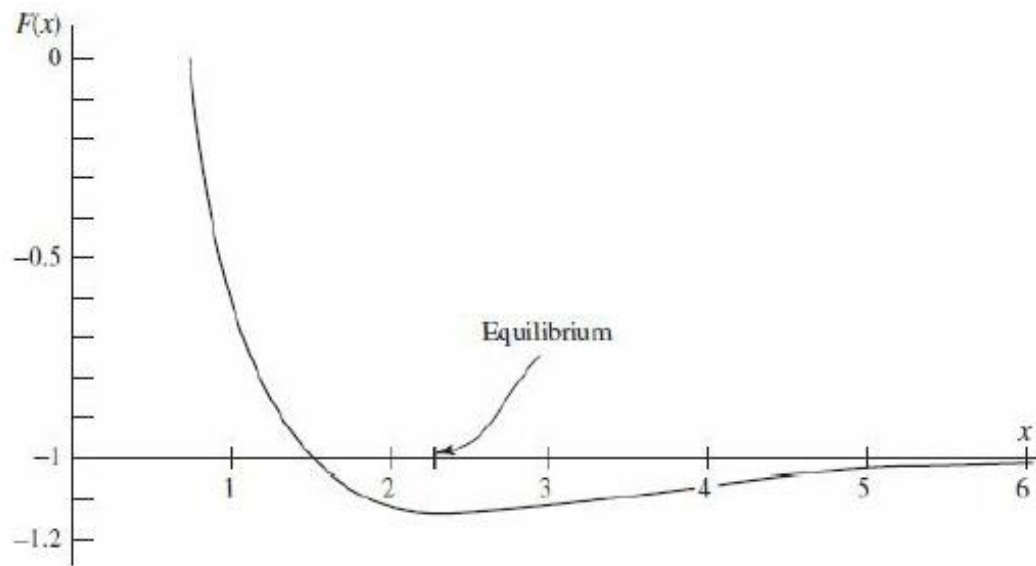
선형으로 결합하여 위와 같은 시행함수를 생각하자.

수소 분자 이온

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= E_1 - 2|A|^2 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\left\langle \psi_0(r) \left| \frac{1}{r'} \right| \psi_0(r) \right\rangle + \left\langle \psi_0(r) \left| \frac{1}{r} \right| \psi_0(r') \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{R} - \frac{1}{a} \left(1 + \frac{a}{R} \right) e^{-\frac{2R}{a}} \qquad = \frac{1}{a} \left(1 + \frac{a}{R} \right) e^{-\frac{R}{a}}\end{aligned}$$

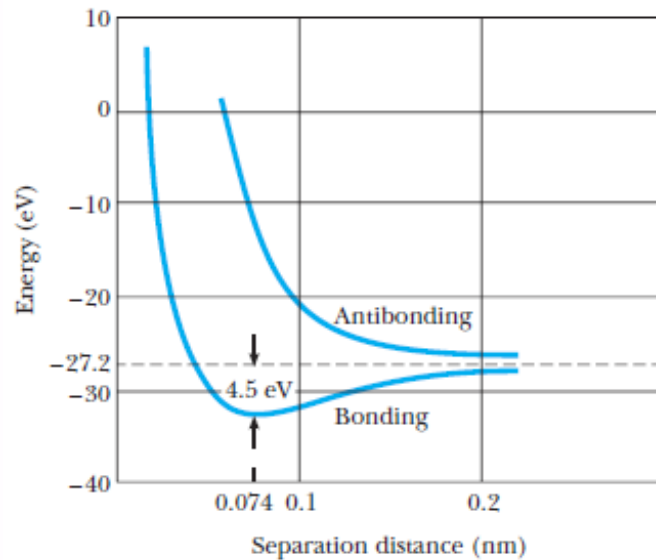
해밀토니안의 기대값

공유 결합



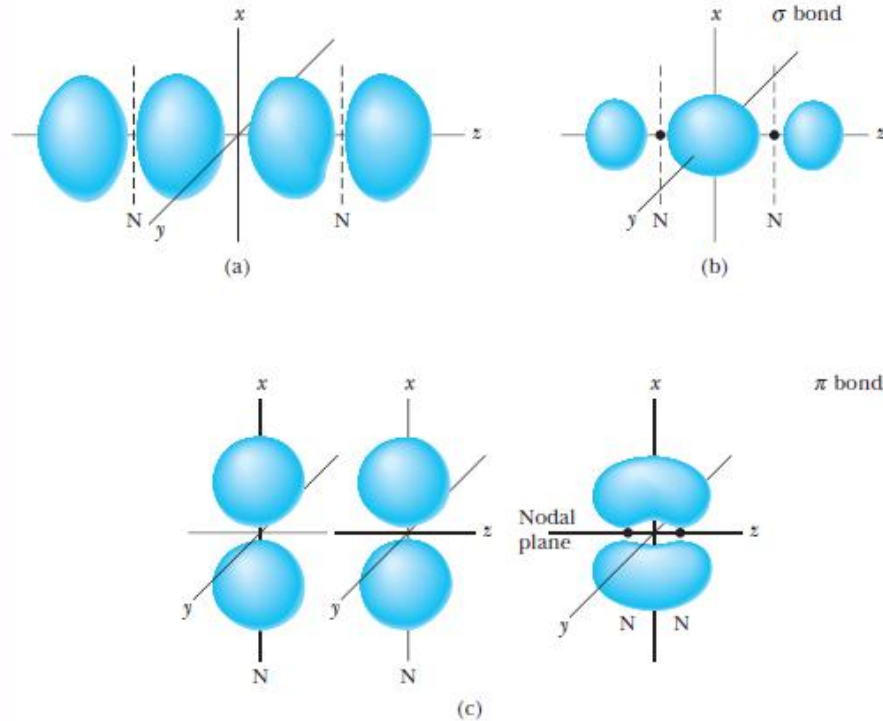
안정적인 평형점이 존재한다는 것을 알 수 있다.

공유 결합



두 개의 전자를 모두 고려하면 스핀의 방향성이 반대인(단일항) 경우 안정적인 결합을 형성함을 알 수 있다.

복잡한 분자에서의 결합



오비탈의 혼성 hybridization

금속과 같은 주기성을 가지는 패턴식열에 대해서
다음과 같은 특징이 일반적으로 알려져 있다.

블록 정리

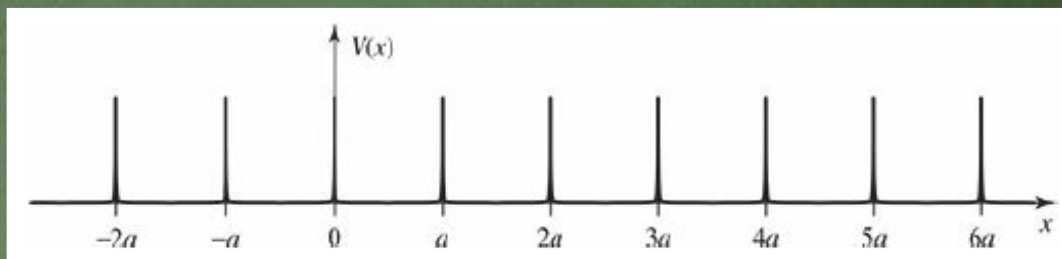
$$V(x) = V(x + a)$$

$$\psi(x) = e^{iqx} u(x)$$

퍼텐셜이 주기성을 갖는 경우

만일 $u(x) = u(x + a)$ 와 같은 주기 함수가 존재한다면,
파동함수는 일반적으로 위와 같이 표현된다.

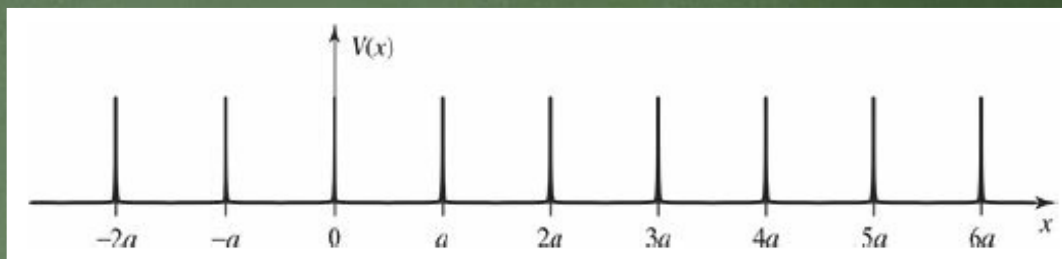
디랙의 빛 모형



$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja)$$

주기적인 퍼텐셜의 한 가지 예로 위와 같이 디랙 델타 함수가
주기적으로 분포하는 예를 다루어 보자.

디랙의 빗 모형



$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja)$$

$$\psi(x + Na) = \psi(x)$$

거시상상의 표현을 위해 위와 같은 주기적인 경계조건을 부여하자.

디랙의 빛 모형

$$e^{iNqa}\psi(x) = \psi(x + Na) = \psi(x)$$

$$q = \frac{2\pi n}{Na} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

블록 정리에 의해 위와 같은 관계를 얻는다.

디랙의 빛 모형

$$0 < x < a$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$-a < x < 0$$

$$\psi(x) = e^{-iq a} (A \sin k(x + a) + B \cos k(x + a))$$

한 편, 앞에서 다룬 것처럼 디랙 델타 함수형 퍼텐셜의
두 가지 경계조건을 적용할 수 있다.

디랙의 빛 모형

$$0 < x < a$$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

$$-a < x < 0$$

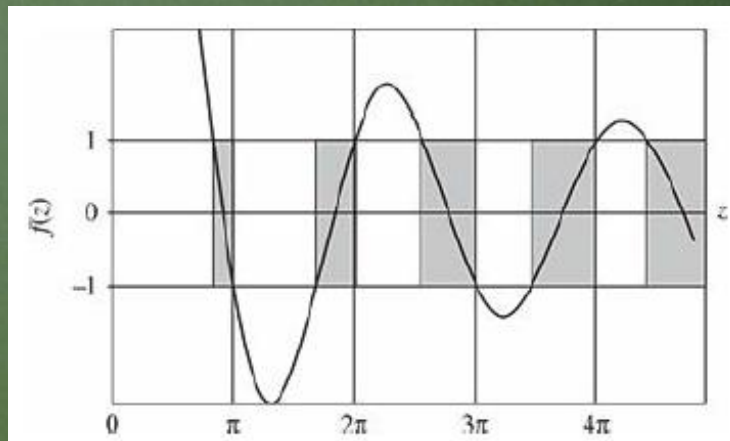
$$\psi(x) = e^{-iq a} (A \sin k(x + a) + B \cos k(x + a))$$

$$B = e^{-iq a} (A \sin ka + B \cos ka)$$

$$kA - e^{-iq a} k(A \cos ka - B \sin ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

디랙의 빛 모형

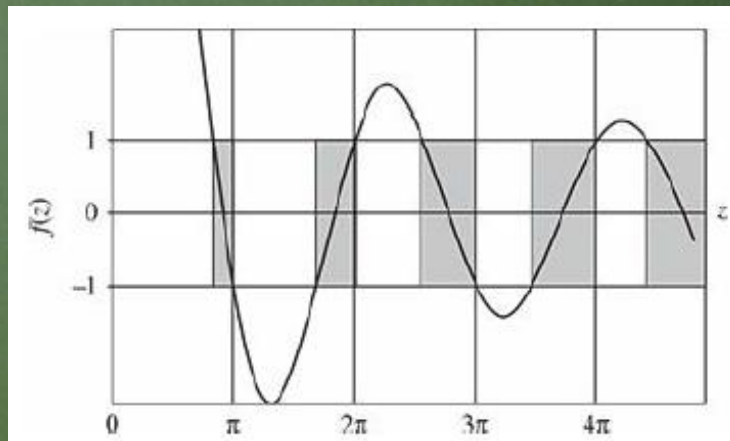
$$\cos qa = \cos ka + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin ka$$
$$\equiv f(z)$$



이 관계식을 풀어서 허용되는 에너지의 조건을 얻는다.

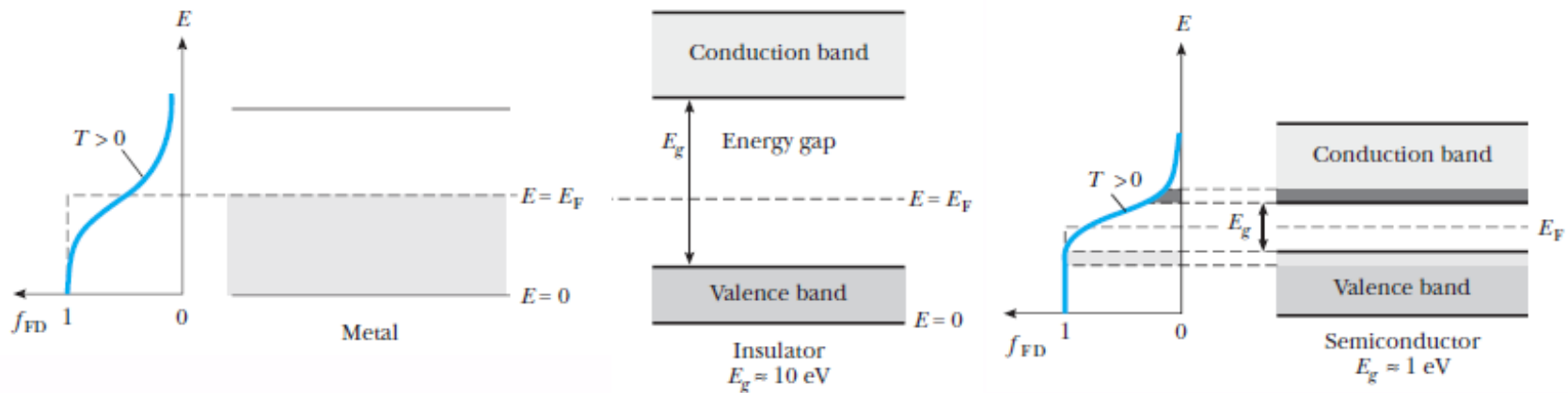
디랙의 빛 모형

$$\cos qa = \cos ka + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin ka$$
$$\equiv f(z)$$



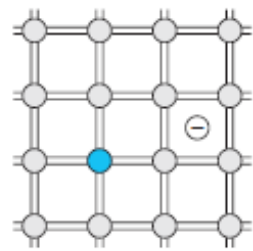
이와 같이 주기적인 퍼텐셜에서는 일반적으로 허용되는 에너지가
띠-간격의 구조를 형성한다.

도체/부도체/반도체

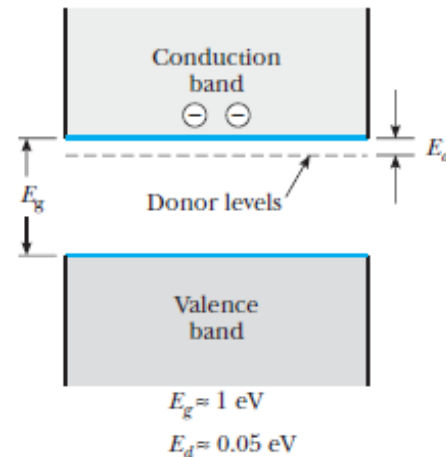


띠-간격 구조는 도체/부도체/반도체를 이해하는 중요한 원리가 된다.

반도체 소자 (n-형 반도체)

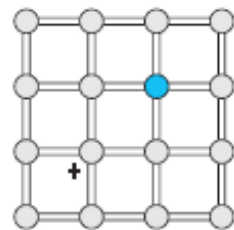


- = Semiconductor atoms
- = Impurity atom with five valence electrons
- ⊖ = Extra electron from impurity atom

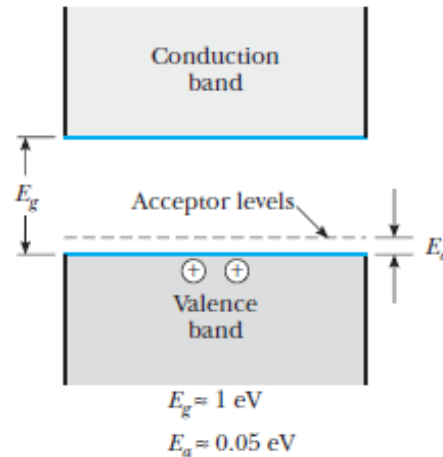


반도체에 불순물을 첨가(도핑)함으로써 특별한 장치를 만들 수 있다.
주개(donor)가 있으면 많은 전자가 생긴다.

반도체 소자 (p-형 반도체)



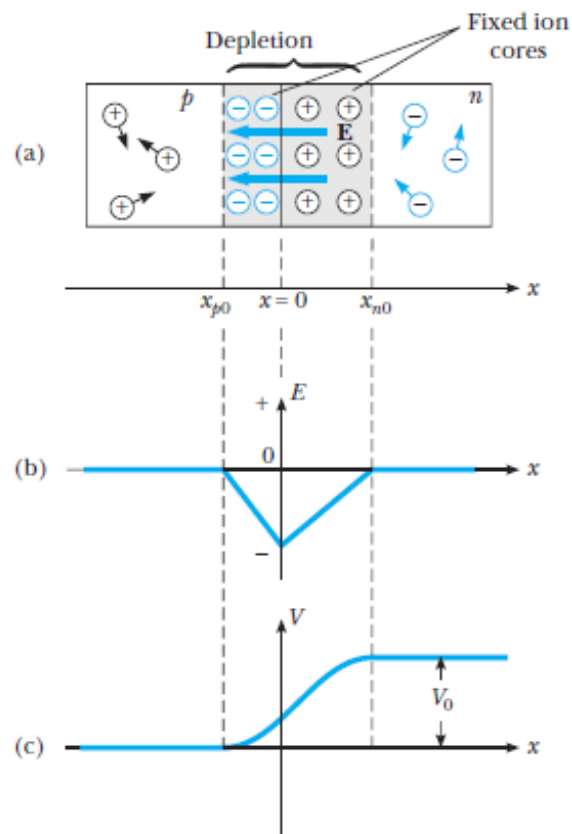
- = Semiconductor atoms
- = Impurity atom with three valence electrons
- ⊕ = Hole, or electron deficiency in a bond



반도체에 불순물을 첨가(도핑)함으로써 특별한 장치를 만들 수 있다.

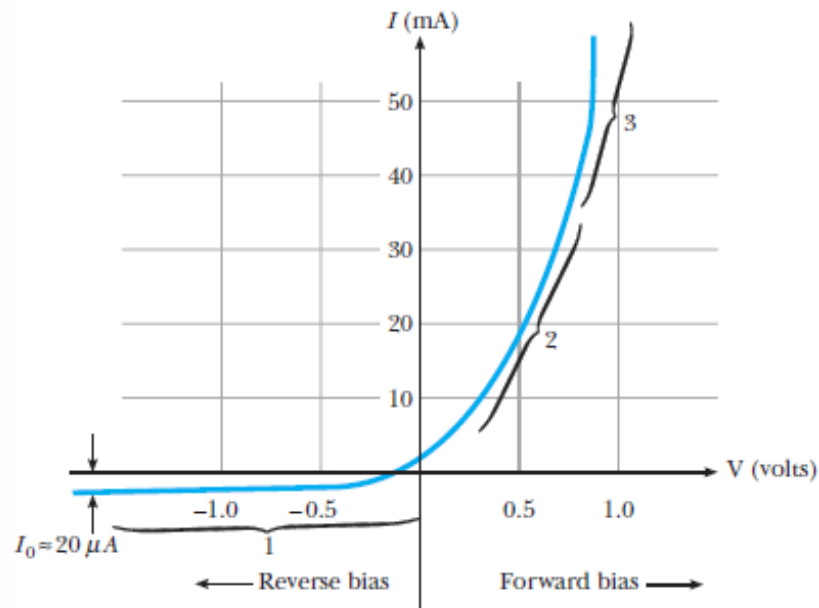
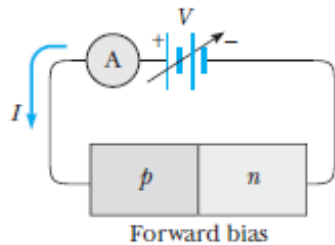
반도체(acceptor)가 있으면 전자를 받을 수 있는 양공이 생긴다.

다이오드 (p-n 접합)



p형 반도체와 n형 반도체를 붙이면
n형 반도체의 많은 전자가
p형 반도체 쪽으로 전달되게 된다.

다이오드 (p-n 접합)



따라서 위의 법칙은 성립하지
않고, 한쪽 방향으로만 전류를
흐르게 보내게 된다.

이렇게 반도체를 사용해서
논리 연산을 올바르게 할 수 있는
소자를 만들 수 있다.