

A_2B_2 분자 구조의 입체성

2학기 화학 I 심화탐구

2025-10-17

목차

I. 탐구 동기	3
II. 오비탈의 수학적 표현	3
III. 결합의 표현	7
IV. 결론 및 고찰	12
V. 참고문헌 및 출처	13

I. 탐구 동기

화학 수업 시간에 선생님께서 A_2B_2 꼴의 분자들(예를 들어 H_2O_2 , N_2H_2 , C_2H_2 등등...)의 결합 구조에 대해 가르쳐 주셨다. 그런데, 두 개의 굽은형이 붙은 듯한 모양의 이 분자들은 이상하게도 어떤 것은 모든 원자들이 한 평면 위에 있고, 어떤 것은 그렇지 않고 꼬여 있다. 이 건 왜 그런 것일까?

찾아본 결과, 간단한 답은 비공유 전자쌍 때문이라는 것이다. 예를 들어 입체구조인 H_2O_2 는 중심원자인 O의 비공유 전자쌍이 두 개라서 굽은형과 비슷한 모양을 갖고, 평면구조인 N_2H_2 는 중심원자인 N의 비공유 전자쌍이 한 개라서 비공유 전자쌍을 포함해서 보았을 때 평면삼각형과 비슷한 모양을 갖게 되는 구조가 만들어진다. 실제로도 cis형과 trans형 N_2H_2 는 결합각이 120° 에 가깝다고 한다. 이것도 맞는 말이라고 하나, 어딘가 끼워맞추는 설명 같기도 하고 직관적으로 납득이 잘 되지 않는다.

사실 무기(無機)화학이 대부분인 화학 I 과정에서는 특히 오비탈과 화학 결합 부분에서 타당한 근거 없이 자명하게 받아들이기 어려운 개념을 일방적으로 선언하거나 우연히 비슷한 특성을 가진 다른 사례로 비유하여 이해시키려는 경향이 강하다. 물론 이것을 고등학생으로서 배우는 우리는 양자역학 위에 쌓아 올려진 이런 미시적인 물리화학 개념들을 아무런 기초 없이 제대로 학습하기가 불가능하다. 하지만 그러려니 하고 넘어가면서 생긴 궁금증은 갈수록 누적되기 마련이고, 결국 심화탐구를 진행하는 계기로 이 심오하고 복잡한 분야에 발만 담가보기로 했다.

II. 오비탈의 수학적 표현

화학 결합의 근원은 전자 간 상호작용이다. 공유결합은 공유전자쌍으로 인해 강한 전기적 인력이 작용하는 것으로, 결국 물리학이 관여한 이상 전자를 모식적으로 나타낸 보어 원자 모형 같은 체계로는 결합각 같이 구체적인 설명이 어렵다. 그래서 실제로 전자의 위치를 기술하는 방식인 오비탈의 관점으로 보아야 제대로 설명할 수 있다.

교과서와 각종 교재에서 오비탈(orbital)은 궤도 함수(orbital function)라고 잠깐 언급된다. 전자가 존재할 수 있는 위치의 확률분포를 나타낸 것이 오비탈이고, 이것은 사실 파동함수

이다. 즉 전자는 측정하기 전에는 특정한 규칙에 따라 존재할 범위가 정해진채로 있다가¹ 측정 시 어딘가에 마치 원래 거기 있었던 것처럼 있게 된다. 즉, (여태까지 인간이 정리한 바에 따르면) 양자역학 법칙으로 기술될 수 있다.

일반적인 파동함수는 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 와 같이 나타내고, $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 은 어떤 입자, 여기서는 전자가 시간 t 에 위치 \mathbf{r} 에 존재할 확률을 나타낸 확률밀도함수(이하 PDF)이다.

파동함수는 슈뢰딩거 방정식의 해가 된다. 시간에 따라 에너지가 일정하게 유지되는 정상 상태의 계에서²는 시간 독립(비의존) 슈뢰딩거 방정식을 사용한다. 시간에 따라 뭔가가 변하지 않으므로 파동함수는 $\psi(\mathbf{r})$ 로 써도 무방하다.

$$\hat{\mathcal{H}}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

이제부터 \mathbf{r} 은 벡터라고 하고 그냥 일반 이탤릭체 r 로 적겠다. 해밀토니언은 (몇 가지 조건 하에) 계의 에너지 성분을 내놓는 연산자이다. 이 방정식은 고윳값과 고유벡터에 관한 문제이고, E 는 에너지로 파동함수에 대응하는 고윳값이 된다. 해밀토니언은 그 의미가 이제 에너지와 차이가 없으므로

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \quad (2.2)$$

이때 \hat{T} 는 운동에너지 연산자, \hat{V} 는 퍼텐셜에너지 연산자이다. $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ 를 대입하면

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (2.3)$$

퍼텐셜에너지 \hat{V} 는 수소원자의 경우³ 원자핵과의 인력으로만 주어지므로 쿨롱 힘을 이용한 다. 쿨롱 힘의 크기는 수업시간에 배운대로

$$F = k\frac{Qq}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Qq}{r^2} \quad (2.4)$$

벡터로서는 단순히 방향까지 고려하여

¹측정 전에는 전자가 측정 결과로 나타난 곳에 있던 것인지(확정주의적 입장), 전자가 모든 곳에 있는 것인지(코펜하겐 해석), 아무데도 없는 것인지, 알 수 없으므로 논할 가치가 없는 것인지(불가지[不可知]론적 입장) 등에 대한 논의는 아직도 진행 중이지만 대체로 코펜하겐 해석을 따른다. 앞으로 모든 논리 전개는 코펜하겐 해석을 기반으로 한다.

²원자에 귀속된 전자는 정상상태에 존재하며, 보어의 원자 모형이 이를 모식적으로 나타낸다.

³전자가 두 개 이상일 때부터는 전자 간의 상호작용도 고려해야하기 때문에 슈뢰딩거 방정식의 해를 구할 수 없으며, 근사값으로만 구할 수 있는데 그것도 어렵다.

$$\mathbf{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qq}{r^2} \hat{\mathbf{r}} \quad (2.5)$$

이때 \mathbf{r} 은 $\mathbf{r}_Q - \mathbf{r}_q$ 이다. $\hat{\mathbf{r}}$ 이 방향벡터이다.

힘을 구했으니 $W = F s$ 또는 $W = \int_C \mathbf{F} d\mathbf{r}$ 에 따라 원자에 귀속된 전자의 퍼텐셜 에너지는

$$\begin{aligned} V(r) &= - \int_{\infty}^r \mathbf{F} d\mathbf{r}' = - \int_{\infty}^r \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qq}{r'^2} dr' \\ &= - \frac{Qq}{4\pi\epsilon_0} \int_{\infty}^r \frac{1}{r'^2} dr' = - \frac{Qq}{4\pi\epsilon_0} \left[-\frac{1}{r'} \right]_{r'=\infty}^{r'=r} \\ &= - \frac{Qq}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{1}{r} + 0 \right) \\ &= \frac{Qq}{4\pi\epsilon_0 r} \end{aligned} \quad (2.6)$$

수소원자의 경우는 양성자와 전자의 전하량 상댓값을 +1, -1로 보므로 이 상대값의 실제값을 그냥 $\pm e$ 로 두자.

$$V = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.7)$$

이제 드디어 완성된 해밀토니언은

$$\hat{\mathcal{H}} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.8)$$

이것을 슈뢰딩거 방정식에 대입하면

$$\left[- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi = E \psi \quad (2.9)$$

원자는 동그랴게 생겼으므로 구면좌표로 변환하기 위해 아래 꼴을 놓자.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y(\theta, \varphi) \quad (2.10)$$

이제 라플라시안 ∇^2 과 각도 연산자를 구한 뒤, 라플라시안을 대입한 슈뢰딩거 방정식을 r 로 묶어 분리해서 $rR(r) =: u$ 처럼 치환하고 정리하여 나오는 1차원 상미분방정식에 라게르 다항식 표준해를 적용하여 풀면 가정했던 형태가 다음과 같이 모두 주양자수 n , 부양자수 ℓ 과 자기양자수 m 에 의존하여 나옴을 알 수 있다.

Figure 2.1 — 진짜 계산했습니다4.

The image shows a handwritten mathematical derivation of the hydrogen atom wavefunction. It starts with the Schrödinger equation in spherical coordinates and separates the variables into radial and angular parts. The radial equation is solved using a power series method, leading to the associated Laguerre polynomials. The angular part is solved using spherical harmonics. The final result is the wavefunction $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, where $R_{nl}(r)$ is the radial part and $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ is the spherical harmonic. The derivation includes various mathematical steps, substitutions, and references to physical constants like the Bohr radius a_0 .

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.11)$$

그리고 이것의 구체적인 식은

$$\psi_{nlm} = N_{nlm} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^\ell \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (2.12)$$

해괴망측하다.

R 은 전자가 핵으로부터 얼마나 떨어져 있는지에 대한 확률분포, Y 는 오비탈의 모양과 위상, ℓ 과 m 은 각운동량에 따른 방위(부) 양자수와 자기양자수로 공간 대칭성과 방향성을 결정한다. 오비탈 모양이 왜 그런지는 유도 과정 중간에 나온 르장드르 다항식 P_ℓ^m 의 특정 값들을 보면 이해가 된다. ℓ 과 m 양자수는 각각 연관 르장드르 미분방정식의 해인 르장드르 다항식과 라게르 미분방정식의 해인 라게르 다항식을 일반화로 가지면서 자연스럽게 양자화된 변수 조건이 도출되는데서 유래한다. n 양자수는 라게르 다항식이 무한으로 발산하는 것을 막는 라게르 다항식 조건에 따라 정의되는 값이다.

결과는 수업시간에 배운대로이다. 중요한 것은, 파동함수가 구면좌표계로 나타내어질 때 양자수 세 개에만 의존한다는 것이다.

4다만 잘 알려진 식들은 인터넷 찾아보면 단순 계산 부분이 정리되어 있는 것들이 나와서 도움을 많이 받았습니다.

하지만 다른 점이 있다면 각각 오비탈을 수식으로 표현할 수 있게 되었다는 것인데, 예를 들어 $2p_x$ 오비탈을 구해보자. 단, Y_ℓ^m 의 값은 이미 알려진 것을 사용한다. 세 가지 m 의 값 $-1, 0, +1$ 에 따라 각각 세 가지 p 오비탈 값이 생기지만, $m = 0$ 일 때 p_z 오비탈을 제외하고는 복소수이므로($p_{\pm 1} = Y_1^{\pm 1} \propto e^{\pm i\varphi}$) 선형결합 및 정규화를 적절히 하여 실수형으로 변환한다.

$$p_x, p_y \propto \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_1^{-1} \mp Y_1^{+1}) \quad (2.13)$$

그러므로

$$\begin{aligned} p_x &\propto \sin \theta \cos \varphi \\ p_y &\propto \sin \theta \sin \varphi \\ p_z &\propto \cos \theta \end{aligned} \quad (2.14)$$

파동함수에 $n = 2, \ell = 1$ 을 실제로 넣어보면

$$\psi_{2p_x} = N_{21} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta \cos \varphi \quad (2.15)$$

이고 알려진 정규화상수의 값은

$$N_{21} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^5}} \quad (2.16)$$

이제 전체 파동함수 값은

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta \cos \varphi \quad (2.17)$$

와 같이 나오게 되어 필요한 경우 오비탈의 정확한 식을 알 수 있게 된다는 것이다.

여기까지가 제일 어려운 부분이었다⁵.

III. 결합의 표현

두 원자 A, B가 근접하여 결합을 이룰 때 두 원자의 오비탈 $\varphi_A(r), \varphi_B(r)$ 에 대해 분자가 가질 오비탈은 결국 두 파동의 선형결합으로 인한 간섭이다. 엄밀히 말하면 이것은 무한차원의

⁵주제 선정을 좀 후회하고 있습니다….

파동함수를 두 기저로 나누어 표현한 것으로 그럴싸한 근사 식을 잡은 것이라고 할 수 있다.
이런 방식을 LCAO(linear combined atom orbital, 선형결합 원자오비탈)이라고 한다.

$$\psi(r) = c_A\varphi_A(r) + c_B\varphi_B(r) \quad (3.1)$$

파동함수를 이렇게 가정하고 슈뢰딩거 방정식과 변분 원리를 적용해 c 와 E 를 구한다.

변분원리란 임의의 가정한 파동함수(trial wave function) ψ_t 에 대해 그 기댓값

$$E[\psi_t] = \frac{\langle \psi_t | \hat{\mathcal{H}} | \psi_t \rangle}{\langle \psi_t | \psi_t \rangle} \quad (3.2)$$

은 항상 실제 에너지 바닥상태보다 크거나 같다는 것이다.

슈뢰딩거 방정식

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi \quad (3.3)$$

에서 우리가 원하는 것은 모든 기저에 대해 $\hat{\mathcal{H}} - E = 0$ 인 것이다. 그러므로 우선, 양변에 $\langle \varphi_A |$ 를 취해서 변분 원리를 사용하도록 하자.⁶

$$\langle \varphi_A | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle = E \langle \varphi_A | \psi \rangle \quad (3.4)$$

대입하면

$$\langle \varphi_A | \hat{\mathcal{H}} | (c_A\varphi_A + c_B\varphi_B) \rangle = E \langle \varphi_A | (c_A\varphi_A + c_B\varphi_B) \rangle \quad (3.5)$$

해밀토니안과 내적 연산은 모두 선형이므로

$$c_A \langle \varphi_A | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_A \rangle + c_B \langle \varphi_A | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_B \rangle = E(c_A \langle \varphi_A | \varphi_A \rangle + c_B \langle \varphi_A | \varphi_B \rangle) \quad (3.6)$$

여기서 항을 좀 정리하겠다.

먼저, 파동함수가 중첩하는 것은 내적으로 표현할 수 있다. 이때 복소함수임을 고려해 에르미트 내적을 한다.

$$S_{AB} = \langle \varphi_A | \varphi_B \rangle = \int \overline{\varphi_A} \varphi_B d\tau \quad (3.7)$$

⁶ $\langle \psi | = |\psi \rangle^\dagger$

또, 브라켓을 간단히 표현할 수 있도록 정리하자.

$$H_{AB} = \langle \varphi_A | \hat{\mathcal{H}} | \varphi_B \rangle \quad (3.8)$$

이걸로 전개한 식을 정리하면

$$c_A H_{AA} + c_B H_{AB} = E(c_A S_{AA} + c_B S_{AB}) \quad (3.9)$$

똑같이 $\langle \varphi_B |$ 도 투영시키면 같은 형태로

$$c_A H_{BA} + c_B H_{BB} = E(c_A S_{BA} + c_B S_{BB}) \quad (3.10)$$

이 두 식은 행렬로 한꺼번에 정리할 수 있다.

$$\begin{bmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

이제 각 행렬을 아래와 같이 치환하자.

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{bmatrix}$$

그러면 식은

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c} \quad (3.13)$$

이제 이 방정식은 $(\mathbf{H} - E\mathbf{S})\mathbf{c} = 0$ 이 되므로 이것이 해를 가지려면

$$\det(\mathbf{H} - E\mathbf{S}) = 0 \quad (3.14)$$

기저는 정규화이므로 $S_{AA} = S_{BB} = 1, S_{AB} = S_{BA} = S$ 로 놓고, 또 $H_{AA} = H_{BB}, H_{AB} = H_{BA}$ 라고 가정하면 식이 간단해진다.

그러므로 행렬식은

$$(H_{AA} - E)^2 - (H_{AB} - ES)^2 = 0 \quad (3.15)$$

합차공식으로 인수분해하면

$$[(H_{AA} - E) - (H_{AB} - ES)][(H_{AA} - E) + (H_{AB} - ES)] = 0 \quad (3.16)$$

E 에 대해 나오는 두 근은

$$E_{\pm} = \frac{H_{AA} \pm H_{AB}}{1 \pm S} \quad (3.17)$$

중첩된 정도인 S 가 충분히 작다고 하면 이렇게 근사할 수 있다.

$$E_{\pm} \approx H_{AA} \pm H_{AB} \quad (3.18)$$

즉 H_{AB} 가 클수록 강한 결합이다.

원자오비탈이 같은 부호로 겹치면 보강 간섭이 일어나서 결합이 강하고 안정해지고, 다른 부호로 겹치면 상쇄 간섭이 일어나서 결합이 약화 또는 소멸된다.

2주기 원소들의 p 오비탈($\ell = 1$)은 앞서 보았듯이

$$\begin{aligned} p_x &\propto xf \\ p_y &\propto yf \\ p_z &\propto zf \\ \text{where } f(r) &= re^{-\alpha r} \end{aligned} \quad (3.19)$$

드디어 결합에 대해 보자. 가장 빈번하게(화학 I 범위 내에서는 항상) 일어나는 공유결합은 딱 두 가지 종류로 나뉜다.

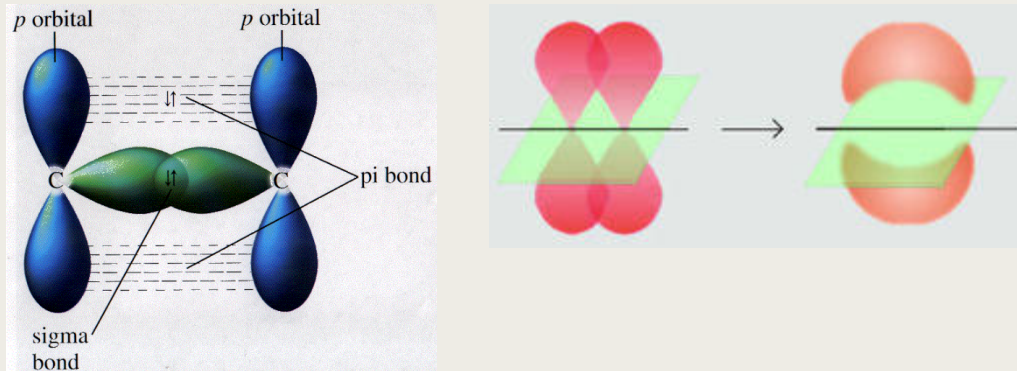
- σ 결합: 결합 축을 따라 오비탈이 정면으로 겹친다($s-s, s-p_z, p_z-p_z$). 결합 축을 대칭선으로 전자 밀도가 약간 원기둥처럼 생기게 분포한다. 따라서 원자핵간 결합 축을 회전해도 결합이 깨지지 않는다.
- π 결합: 결합 축에 수직인 p_x, p_y 오비탈이 옆면으로 평행하게 겹친다. 이때 두 오비탈이 중첩되면 전자 밀도는 양 끝 부분에 집중되면서 원자핵부터의 거리가 멀어지는데, 이 때문에 결합 강도도 약하고 회전도 불가능하다.

단일 결합은 모두 시그마 결합이며, 이중 결합은 시그마 결합과 파이 결합 한 개, 삼중 결합은 시그마 결합과 파이 결합 두 개로 되어 있다.

파이 결합 상태로 결합을 회전시킬 시 결합이 깨지기 쉽다는 것을 보여 보겠다⁷.

⁷여기부터는 아무 도움도 안 받고 제가 직접 해보는 것이기 때문에 증명 과정이 틀릴 수 있습니다. 사실 이거 하려고 앞의 내용을 정리한 것입니다...

Figure 3.2 — σ 결합과 π 결합의 시각화



회전 연산자를 $\hat{R}_z(\alpha)$ 로 놓자. 결합축을 z 축으로 잡고 그 주위로 회전시키는 각도는 α 라는 뜻이다. 앞서 구면좌표계에서 파동함수를 기술할 때 나왔던 R 과는 다른 것이다. 이 연산자는 Y_ℓ^m 에 위상 변환 연산자로 작용하여 이렇게 될 것이다.

$$\hat{R}_z(\alpha) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = e^{im\alpha} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (3.20)$$

우리의 2주기 원소 상황에서 시그마 결합은 $m = 0$ (s 오비탈)일 때 일어나므로 $e^{i\alpha \cdot 0} = 1$ 이 되어 실제 회전이 변하지 않는다. 파이 결합은 $m = \pm 1$ 일 때 일어나므로 회전하면 $e^{\pm i\alpha}$ 위상인자가 붙어 위상이 돌아간다.

구체적으로 p 오비탈끼리 붙은 파이 결합의 예시를 보자. 이번에는 직관적으로 편하게 결합축을 x 로 놓아 보겠다. 두 원자 A, B가 있고 A의 파이 결합 오비탈이 $p_y^{(A)}$ 라고 하자. B를 x 축으로 θ 만큼 회전하면

$$p_y^{(B)'} = \cos \theta p_y^{(B)} + \sin \theta p_z^{(B)} \quad (3.21)$$

처럼 되어 성분 간에 선형 결합을 일어나게 한다. 이때 두 오비탈의 중첩은 다음과 같은데,

$$\begin{aligned} S(\theta) &= \langle p_y^{(A)} | p_y^{(B)'} \rangle = \int p_y^{(A)} p_y^{(B)'} d\tau \\ &= \cos \theta \int p_y^{(A)} p_y^{(B)} d\tau + \sin \theta \int p_y^{(A)} p_z^{(B)} d\tau \end{aligned} \quad (3.22)$$

오비탈이 결합 축에 대칭이므로 기함수의 적분 원리에 따라 마지막 항이 소거된다. 즉

$$S(\theta) = \cos \theta \langle p_y^{(A)} | p_y^{(B)} \rangle \quad (3.23)$$

θ 가 $\frac{\pi}{2}$ 에 근접할수록 겹침이 사라지게 된다. 이때 H_{AB} 도 결국 S 와 양의 상관관계가 있으므로 아까 에너지 식

$$E_{\pm} \approx H_{AA} \pm H_{AB} \quad (3.24)$$

에 따라 보강간섭인 E_+ 와 상쇄간섭인 E_- 간 에너지 차이가 줄어들게 되어 결합이 점점 깨지게 된다.

결론은, 파이 결합을 가진 분자인 경우 결합 구조가 입체가 되게 되면 결합이 돌아가면서 깨지므로 입체가 될 수 없고 평면 상태에서 안정하게 존재한다는 것이다.

IV. 결론 및 고찰

결론은, 꼭 A₂B₂ 꼴의 분자가 아니더라도 파이 결합이 있는 원자와 결합한 부분끼리는 평면 구조를 가져야 결합이 유지될 수 있다는 것이다. 그래서 H₂O₂는 입체 구조인데 N₂H₂나 C₂H₂는 평면 구조인 것이었다. 중심원자끼리 파이 결합이 생겼기 때문에 결합이 돌아가서 말단 원자가 입체 구조를 이루려고 하게 되면 결합이 깨지게 되기 때문이다. 그러므로 수험생들이 올려 놓은 것으로 보이는 비공유 전자쌍으로 결합의 평면 또는 입체 여부를 설명하는 인터넷 글이나 질의응답 내용은 부정확한 내용이었다. 비공유 전자쌍은 여기서는 평면 또는 입체 구조를 결정하는 것이 아니라 반발력을 통해 결합각을 결정하게 된다.

다른 생각해볼 점은 과학 원리를 수식으로 표현하는 것에 대한 것이다. 계산으로 보여야 엄밀하겠다는 생각으로 양자역학적 계산들을 하는 과정을 동원했는데, 물론 식으로 보니 서술이 옳겠다는 느낌이 더 들기는 하지만, 양자역학을 공부하며 느낀 양자역학 식들의 특징인 ‘써놓은 걸 보면 실제보다 더 어렵게 느껴지는 것’이 여과 없이 드러난 예시이기도 하고, 결국 진짜 입체 구조가 달라지는 이유를 알게 되는데는 식을 통한 증명이 절대로 필수적이지 않았다. 수학과 과학 간 연관 관계의 필연성에 대해 고민하게 되는 부분이다.

과학에서의 공식은 결국 자연에서 일어나는 수많은 현상들 중 관심 있는 현상에 대한 양만 골라서 변수와 상수로 놓고 실험적으로 검증해서 들어맞으면 쓰기로 하는 것이다.

이 세상을 기술하기 위해 수학과 과학은 서로에게 영향을 주며 발전해 왔다. 그리고 수치적이고 실질적인 계산을 도출해야 하는 상황이 아니더라도 분명히, 수학은 과학에서 큰 부분을 차지한다. 그러나, 인간은 잘 생각해보면 천부적인 미적분 능력을 본능적으로 탑재하고 있다. 뭔가 물체가 날아올 때, 그 궤적을 예측해서 잡기도 하고 피하기도 할 수 있는 능력이

그 증거라고 본다. 즉 수식으로 적을 때, 변수 한두 개로 일게나 이제 미적분을 하여 표현할 수 있는 정도의 내용들은 수식이 없어도 적절한 비유와 예시만 들어주면 여태까지 살아오면서 터득한 자연에 대한 경험적 상식을 토대로 중학생도 ‘이해’할 수 있다. 그 대표적인 예가 원래는 맥스웰 방정식으로 기술되는 전자기유도일 것이다.

물론 중학생 때부터 ‘이해’했다고 생각한 내용들은 사실 이해한 것이 아니다. 이해했다고 착각하고, 막연하게 받아들인 뒤 써먹고 있는 것이다. 정말로 원리에 대해 심층적으로 알아서 과학을 이해한다는 것은, 원리를 기술하는 수식 표현의 의미는 물론, 그 수식 너머에 있는 현상에 대한 의미까지 알아야 할 것이라고 생각한다. 일단 나는 가장 단순해 보이는 식에서조차 그렇게 하지 못하고 있는 것 같다.

If you want to understand nature, you must understand the language she speaks, and that language is mathematics.

— Richard Feynman

(“자연을 이해하고 싶다면 자연이 하는 언어를 이해할 수 있어야 한다. 그 언어는 수학이다.”, 리처드 파인만.)

V. 참고문헌 및 출처

- David J. Griffiths 외, “Introduction to Quantum Mechanics” 3/e
- David J. Griffiths, “Introduction to Electrodynamics” 4/e
- Theodore Brown, “Chemistry : the central science”
- Friedrich Hund, “Zur Deutung der Molekelspektren”
- Paul Falstad, “Hydrogen Atom Orbital Viewer”(<https://www.falstad.com/qmatom/>)
- Encyclopedia of Mathematics, “Laguerre polynomials”(https://encyclopediaofmath.org/index.php?title=Laguerre_polynomials)
- Encyclopedia of Mathematics, “Legendre polynomials”(https://encyclopediaofmath.org/wiki/Legendre_polynomials)
- <https://sites.astro.caltech.edu/~srk/Ay126/Lectures/Lecture2/QMChap7.pdf>
- Richard Feynman, “The Character of Physical Law”

감사합니다 ^^