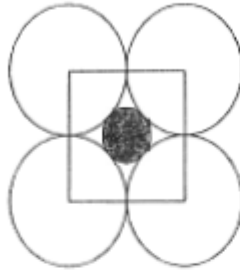


Open Book Test

1. 다음 그림은 어떤 가상의 2차원 이온 고체의 unit cell (정사각형)을 나타낸 것이다. 그림에서 큰 원은 음이온을 나타내고 작은 원은 양이온을 나타낸다.



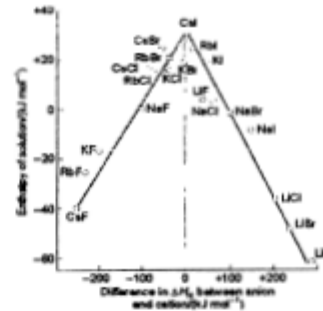
- (1) 이 이온화합물의 조성식은 (A_nB_m)? r
- (2) 양이온과 음이온의 배위수는? s
- (3) 이 2차원 이온고체에서 양이온과 음이온이 그림과 같이 접촉되어 있고 음이온끼리도 접촉하고 있다면 양이온과 음이온이 차지하는 공간의 비는 (packing ratio)? t

2. 1의 구조에서 Madelung constant를 구하는 식을 써 보아라. (음이온의 전하는 $-Ze$, 양이온의 전하는 $+Ze$ 라고 하여라.) 하나의 음이온을 중심으로 생각하고 거기에서부터 다섯 번째 이온까지 내의 음이온과 양이온을 생각하여라. 30

3. 다음의 변화의 엔탈피 값으로부터 $KCl(s)$ 의 격자 에너지를 구하여라. (Born-Haber cycle을 그려라.)

- $K(s)$ 의 sublimation : 89 kJ/mol
- $K(g)$ 의 ionization : 425 kJ/mol
- $Cl_2(g)$ 의 dissociation : 244 kJ/mol
- $Cl(g)$ 의 electron gain : -355 kJ/mol
- $KCl(s)$ 의 formation : -438 kJ/mol

4. 다음 그림은 이온 결합 물질에서 수화열 (ΔH_{hyd})과 용해열 (ΔH_{sol})과의 상관관계를 나타내는 그래프이다. 이유를 설명하여라. 20



5. H_3^+ 의 MO를 건설하고 MO의 에너지 준위도를 그리고 전자배치를 써라. 30

6. 다음 분자 또는 이온의 루이스 (Lewis) 구조식을 그리고 각 원자의 형식전하를 표시하라. 공명구조가 여러개 존재하는 경우에는 가장 가능성이 큰 구조를 동그라미로 표시하라. (형식전하가 0일 경우에는 표시하지 말것)

- (a) CO_2 (3개) (b) CO_3^{2-} (3개) (c) BF_3 (4개)
- (d) F_3BNH_3 (1개) 5

7. 암모니아 (NH_3)에 대하여 다음을 답하라.

- (a) 루이스 구조식을 그려라. 5
- (b) VSEPR 이론에 근거하여 NH_3 의 구조를 자세히 설명하여라. 10
- (c) 원자가결합이론에 근거하여 NH_3 의 구조와 결합을 자세히 설명하여라. 15

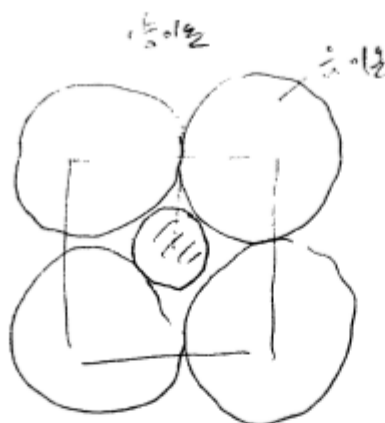
8. C_2 의 분자에 대하여 다음을 답하라.

- (a) C_2 의 분자궤도함수의 에너지 준위도를 그려라. 10
- (b) (a)의 각 분자궤도함수는 어떤 원자 궤도함수들의 조합으로 형성되었는가를 오비탈 (원자, 분자)의 그림으로 설명하여라. 20
- (c) C_2 의 전자배열을 써라. 10
- (d) C_2 의 결합차수는? 또한 어떤 결합인가. (σ 결합, π 결합 몇 개씩?) 10
- (e) 위로부터 C_2 의 루이스 구조식을 써라. 5

9. 중성의 NH_2 molecular fragment는 구부러진 모양이다. NH_2 의 first excited state는 더 구부러져 있겠는가 아니면 더 펴져있겠는가? (Walsh diagram을 그리고 설명하여라.) 20

10. $O_2^{2-}(g) + O_2(g) \rightarrow O_4^{2-}$ 반응의 standard enthalphy of reaction을 구하라. 20

1. (20) (1)



unit cell 안에

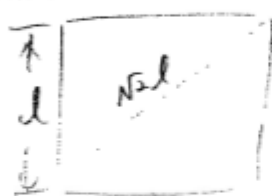
$$\text{응이온의 } N = 4 \times \frac{1}{4} = 1$$

$$\text{양이온의 } N = 1$$

$$\therefore \text{조성비} = AB$$

(2) $4:4$

(3) unit cell



$$l = 2r_a \quad (r_a : \text{응이온 반경})$$

$$\sqrt{2}l = 2r_a + 2r_c \quad (r_c : \text{양이온 반경})$$

$$= l + 2r_c$$

$$\therefore r_c = \frac{(\sqrt{2}-1)l}{2}$$

$$\text{응이온 면적} = \pi r_a^2 = \pi \left(\frac{l}{2}\right)^2 = \frac{\pi}{4} l^2$$

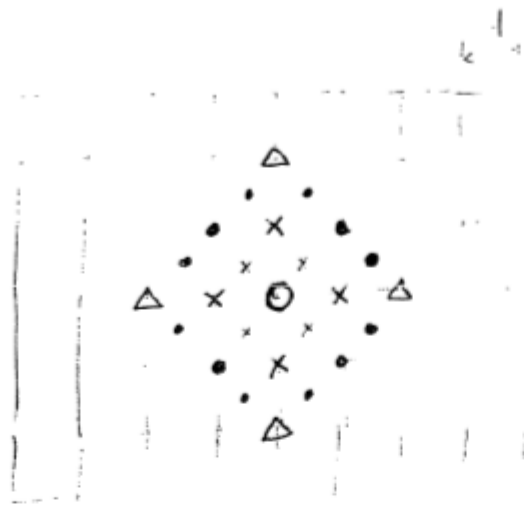
$$\text{양이온 면적} = \pi r_c^2 = \pi \left(\frac{\sqrt{2}-1}{2} l\right)^2 = \pi \frac{3-2\sqrt{2}}{4} l^2$$

$$\therefore \text{packing ratio} = \frac{\frac{\pi}{4} (1+3-2\sqrt{2}) l^2}{l^2}$$

$$= \frac{4-2\sqrt{2}}{4} \pi = \underline{0.92}$$

2

30



- o : 1st anion d
- x : 1st cation $\frac{\sqrt{2}}{2}d$
- : 2nd anion $\sqrt{2}d$
- : 2nd cation $\sqrt{5/2}d$
- Δ : 3rd anion $2d$

0 인 중심된 음이온 간을 사각화했을 때

$d = \sqrt{2}r$ 음이온-양이온 거리

$$V_1 = - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{\frac{\sqrt{2}}{2}d} \quad \frac{4}{r}$$

$$V_2 = + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{d} \quad \frac{4}{\sqrt{2}r}$$

$$V_3 = + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{\sqrt{2}d} \quad \frac{4}{2r}$$

$$V_4 = - \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{8}{\sqrt{5/2}d} \quad \frac{8}{\sqrt{5}r}$$

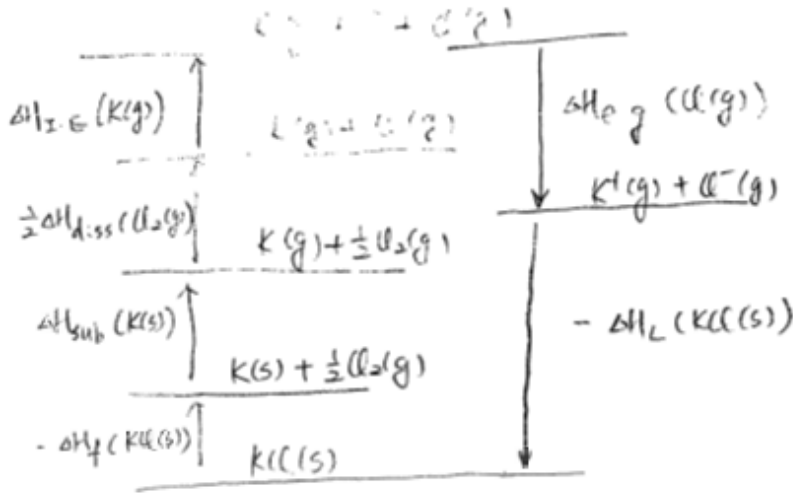
$$V_5 = + \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{2d} \quad \frac{4}{2\sqrt{2}r}$$

$$\therefore V = \frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d} \left(-\frac{4}{\sqrt{2}} + 4 + \frac{4}{\sqrt{2}} - \frac{8}{\sqrt{5/2}} + \frac{4}{2} + \dots \right)$$

$$\frac{1}{r} \left(-4 + \frac{4}{\sqrt{2}} + \frac{4}{2} - \frac{8}{\sqrt{5}} + \frac{4}{2\sqrt{2}} + \dots \right)$$

3.

20

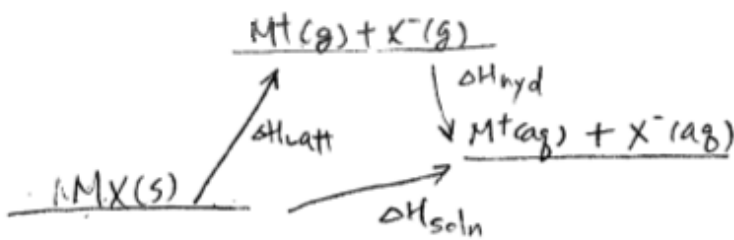


$$\therefore -\Delta H_f(KCl(s)) + \Delta H_{sub}(K(s)) + \frac{1}{2}\Delta H_{dis}(Cl_2(g)) + \Delta H_{I.E}(K(g)) + \Delta H_{e.g}(Cl(g)) - \Delta H_L(KCl(s)) = 0$$

$$\therefore \Delta H_L(KCl(s)) = 438 + 89 + 122 + 425 - 355 \text{ (KJ/mol)} = 719 \text{ KJ/mol}$$

4.

20



$$\therefore \Delta H_{soln} = \Delta H_{Latt} + \Delta H_{hyd} \quad (\Delta H_{Latt} > 0, \Delta H_{hyd} < 0)$$

$$\Delta H_{Lattice} \propto \frac{1}{r_+ + r_-}$$

$$\Delta H_{hyd} \propto \frac{1}{r_+} + \frac{1}{r_-}$$

ΔH_{soln} 이 큰 음의 값을 가지려면 $\Delta H_{Lattice}$ 가 작고 ΔH_{hyd} 이 큰 음의 값을 가지면 된다

즉 이온능 하나는 크고 하나가 작으면

$\Delta H_{Lattice}$ 는 작을 양의 값을 갖고 ΔH_{hyd} 는 큰 음의 값을 가지게 되므로 ΔH_{soln} 은 큰 음의 값을 갖는다
 $\therefore \Delta r \uparrow, \Delta H_{soln} \uparrow$ (음의 값으로)

(30)

linear H_3^+ +triangular H_3^+ 

$$30 = \frac{1}{2} \{ \phi_{1sA} - \sqrt{2} \phi_{1sB} + \phi_{1sC} \}$$

$$20 = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_{1sA} - \phi_{1sC} \}$$

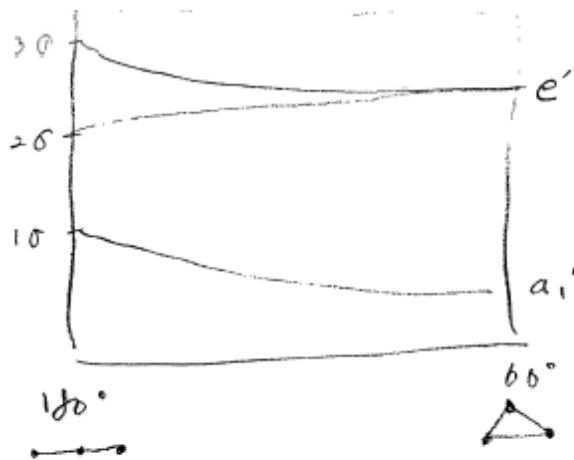
$$10 = \frac{1}{2} \{ \phi_{1sA} + \sqrt{2} \phi_{1sB} + \phi_{1sC} \}$$

$$e' = \frac{1}{\sqrt{6}} \{ \phi_{1sA} - 2\phi_{1sB} + \phi_{1sC} \}$$

$$a_1' = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_{1sA} - \phi_{1sC} \}$$

$$a_1' = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_{1sA} - \phi_{1sC} \}$$

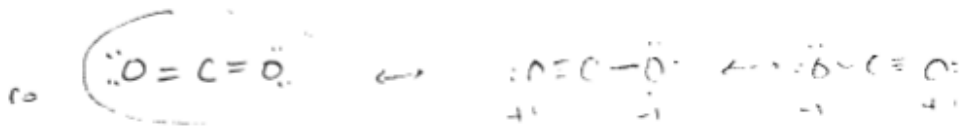
에너지 준위 = correlation diagram



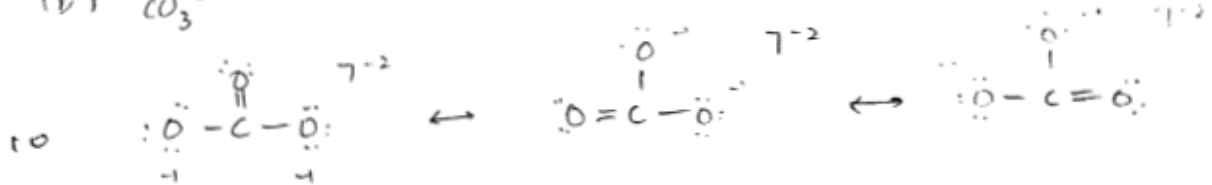
$\therefore H_3^+ \rightarrow$ 전자 배치 : $(a_1')^2$ triangular shape

6

(a) CO_2



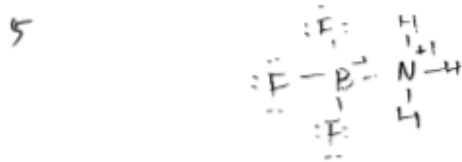
(b) CO_3^{2-}



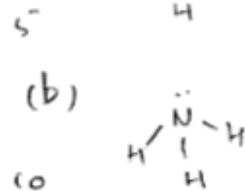
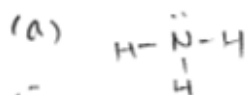
(c) BF_3



(d) F_3BNH_3

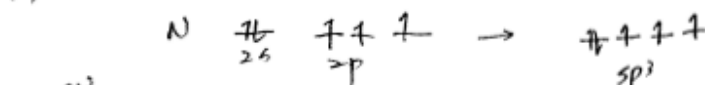


7.



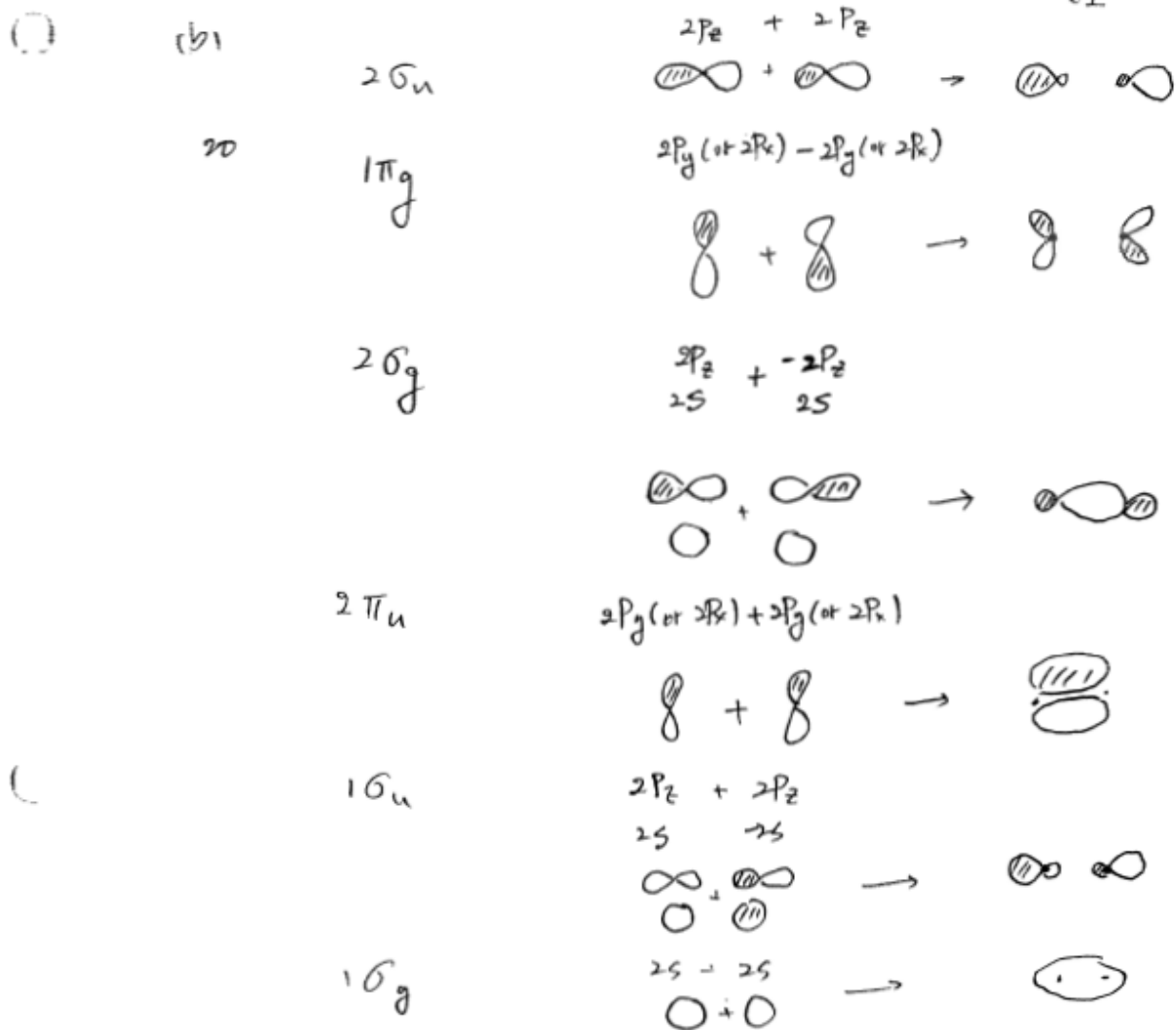
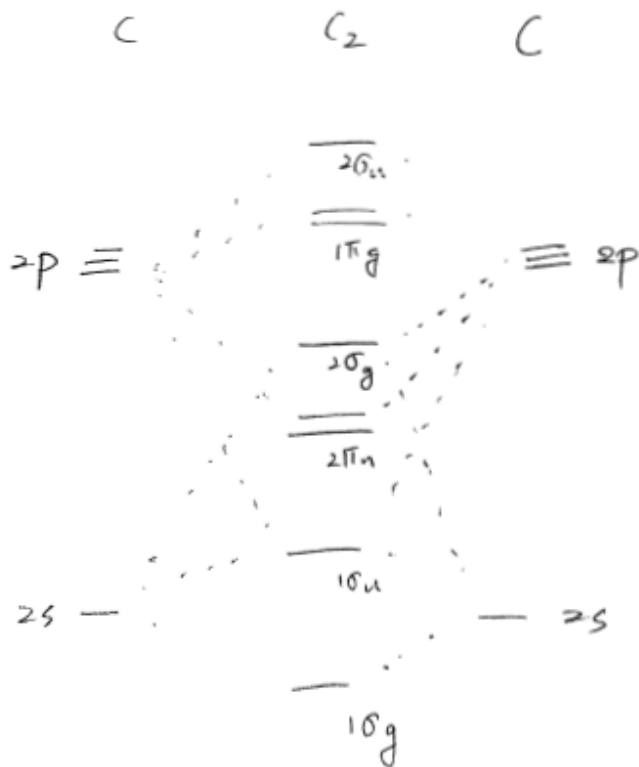
(lp) 비공유 전자쌍 (1개)과 (bp) 결합 전자쌍 (3개)은 서로 간의 반발력을 최소화하기 위해 N을 중심으로 하여 대략 사면체 구조를 갖는다. lp-bp의 반발력이 bp-bp의 반발력보다 크므로 $\angle \text{HNH}$ 의 각도는 109.5° 보다 작다.

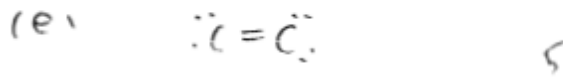
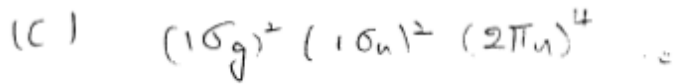
(c) N의 2s와 2p 오비탈이 혼성하여 sp^3 orbital 4개를 만든다.



sp^3 orbital 중 하나에는 비공유 전자쌍 (전자 2개)가 들어가고 나머지 3개의 orbital에는 전자가 하나씩 들어간다. 4개의 orbital들과 H의 1s orbital (전자 1개씩)의 중첩에 의하여 NH_3 가 형성된다. sp^3 orbital은 사면체 구조를 가진다.

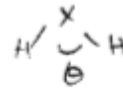
8 C₂
 (55) (a)



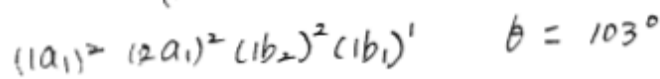


9. XH_2 Walsh diagram

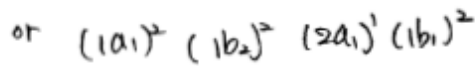
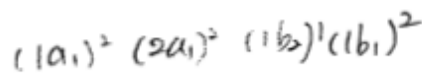
(30)



180° electron configuration



90° 1st excited state electron configuration

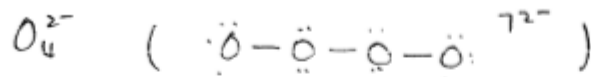
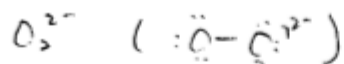
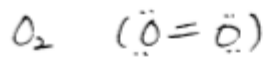


$1b_1$ energy level $\propto \theta$ 이 무한

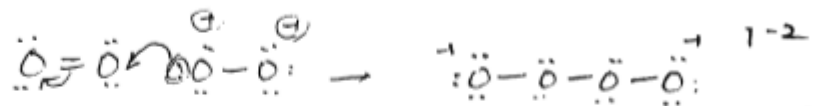
$1b_2$ 이온 전자 2개 $\rightarrow \theta$ 가 커질수록 energy stabilized (great deal)
unstabilized (relatively small)
 $1a_1$ " $\rightarrow$ "
 $2a_1$ " 1개 $\rightarrow$ " energy unstabilized (2개 전자 1개
이므로 not a great deal)

$\therefore \theta$ 는 커진다 (이 때문)

15



제삼의 반응 mechanism



$$\therefore \Delta H_{rxn} = [3 B(O-O) - B(O=O) - B(O-O)] \times (-1)$$

bond enthalpy
is defined
as a positive
#

$B(O-O)$: Bond enthalpy of $O-O$ single bond
 $B(O=O)$: " " $O=O$ double bond

$$\beta(0=c) :$$

$O=O$ double bond

Table 35

$$\therefore -\Delta H_{rxn} = 3 \times 146 - 497 - 146 = -205 \text{ (kJ/mol)}$$

$$\therefore \Delta H_{\text{rxn}} = 205 \text{ kJ/mol}$$