

179

1. 다음표의 빈칸을 채우시오.

원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
14				
	K			
		Strontium		
79				
	Rn			
		Dubnium		

2. Be^{3+} 의 방출 스펙트럼중에는 253nm의 파장을 가지는 line이 있다. 이 line은 주양자수가 5인 궤도에서부터 x인 궤도로 전자가 전이할 때 방출되는 빛이다. x는? (x는 자연수)

3. $5f_{xyz}$ 오비탈 ($\Psi = R(r)Y(\theta, \phi)$)에서 $Y = (\text{const})xyz$ 이다. 다음을 풀어라.

- (1) angular node의 수는 ?
- (2) radial node의 수는 ?
- (3) 오비탈의 모양을 +y 방향에서 xz 평면에 투사한 모양을 그려라. (위상을 정확히 표현하라)
- (4) 오비탈의 모양을 -y 방향에서 xz 평면에 투사한 모양을 그려라. (위상을 정확히 표현하라)

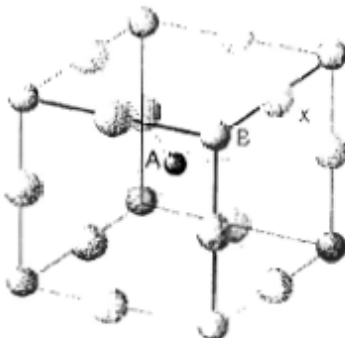
4. Slater's rule에 따라 Al, Si, P, S의 3p 오비탈에 있는 전자가 느끼는 유효핵전하를 구하라.

5. 전기음성도를 정의하는 방법에는 Mulliken의 전기음성도, Pauling의 전기음성도, Allred-Rochow의 전기음성도 등이 있다. 이들의 차이점에 대하여 기술하여라.

6. 우주를 지배하는 네 가지 힘과 각각의 힘이 원자의 형성 과정에 미치는 영향에 대하여 논하라.

7. 금속 Po는 primitive cubic 크리스탈 구조를 갖는다. Po의 밀도는 9196 kg/m^3 이다. Primitive cubic 구조에서 Po의 원자반경을 구하라.

8. 다음 그림은 어떤 이온화합물의 단위세포를 나타낸 것이다. 여기서 A, B는 양이온, X는 음이온을 나타낸다.



(1) 단위세포안에 있는 A, B, X의 수는?

(2) 이 구조의 이름은?

(3) 이 구조를 갖는 대표적인 이온화합물을 하나 들어라.

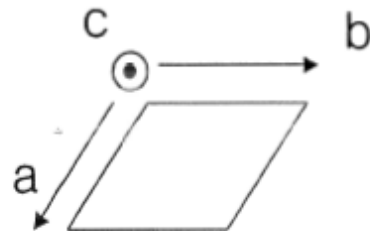
(4) A와 X만으로는 이루어진 고체 구조는 무엇인가?

(5) B의 배위수와 배위 구조는?

(6) 만일 B를 A의 위치로 이동 시킨다면 단위 세포는 어떠한 모양이 되는지 그리고 A, B, C가 각각 그 단위세포 모양의 어떤 부분에 있는지 말하라.

9.

Co는 HCP의 구조를 갖는다. 다음 그림은 HCP 구조에서 단위세포를 C-축 방향에서 내려다본 그림이다. 단위세포에서 9개 Co의 좌표를 적어라. (a, b, c의 값)



10.

(보너스) 지난 반 학기 동안의 강의에 대하여 평하고 (좋은점, 나쁜점 등등 아무거나) 앞으로 강의에 대하여 바라는 점에 대하여 써라.

● 여러 가지 상수

Planck constant: $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

speed of light: $c = 2.997 \times 10^8 \text{ m/s}$

electron charge: $e = -1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$

vacuum permittivity: $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}$

mass of electron: $m_e = 1.602 \times 10^{-31} \text{ kg}$

Po의 원자량 = 210 g/mol

Li의 원자량 = 6.94 g/mol

Br의 원자량 = 79.9 g/mol

2004. 1학기 공헌대학원 무기화학 및 생화학 실험 ①

1

원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
14	Si	Silicon	14 (IVA)	3
19	(K)	Potassium	1 (IA)	4
38	Sr	Strontium	2 (IIA)	5
79	Au	Gold	11 (VIIIB)	6
86	(Rn)	Radon	18 (VIIIA)	6
105	Db	Dubnium	5 (VIB)	7

2

수소꼴 원자의 에너지 계산

10

$$E_n = - \frac{Z^2}{n^2} \times 13.6 \text{ eV} = - \frac{16 \times 13.6 \text{ eV}}{n^2} = - \frac{217.6 \text{ eV}}{n^2}$$

($Z_{\text{He}^{2+}} = 4$)

$$\therefore \Delta E_{n_1 \rightarrow n_2} = - 217.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = - 217.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{25} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$n_1 = 5$

$$\therefore n_2 = \left(\frac{\Delta E (\text{eV})}{217.6 (\text{eV})} + \frac{1}{25} \right)^{-1/2} = \left(\frac{\Delta E (\text{J})}{3.486 \times 10^{-19} (\text{J})} + \frac{1}{25} \right)^{-1/2} \quad \text{--- ①}$$

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$\text{Since } \Delta E = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 2.997 \times 10^8 \text{ m/s}}{253 \times 10^{-9} \text{ m}} = 7.849 \times 10^{-19} \text{ J} \quad \text{--- ②}$$

② → ①

$$n_2 = 4$$

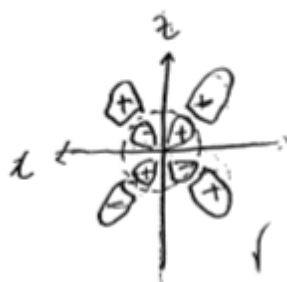
(2)

[3] $5f_{xyz}$ orbital

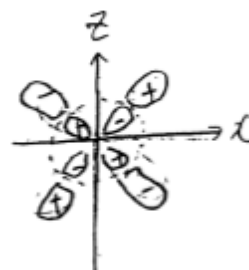
(1) # of angular modes = 3

(2) # of radial modes = 1

(3)



(4)



[4] Slater's rule

$$Al: (1s^2) (2s^2 2p^6) (3s^2 3p^1)$$

$$\sigma_{3p} = 0.35 \times 2 + 0.85 \times 8 + 1.00 \times 2 = 9.50$$

$$\therefore Z_{eff} = 13 - 9.50 = \underline{3.50}$$

$$Si: (1s^2) (2s^2 2p^6) (3s^2 3p^2)$$

$$\sigma_{3p} = 0.35 \times 3 + 0.85 \times 8 + 1.00 \times 2 = 9.85$$

$$\therefore Z_{eff} = 14 - 9.85 = \underline{4.15}$$

$$P: (1s^2) (2s^2 2p^6) (3s^2 3p^3)$$

$$\sigma_{3p} = 0.35 \times 4 + 0.85 \times 8 + 1.00 \times 2 = 10.20$$

$$\therefore Z_{eff} = 15 - 10.20 = \underline{4.80}$$

$$S: (1s^2) (2s^2 2p^6) (3s^2 3p^4)$$

$$\sigma_{3p} = 0.35 \times 5 + 0.85 \times 8 + 1.00 \times 2 = 10.55$$

$$\therefore Z_{eff} = 16 - 10.55 = \underline{5.45}$$

5 전기음성도 (Electronegativity) : Power of an atom to attract electrons to itself when it is part of a compound.

Milliken의 전기음성도 : Milliken 이온화 에너지 (I) 와 전자첨가열 (E_a) 과
 흡수한 전자의 장파장치는 차이 여기서 값을 단축하여
 전기음성도 (χ_M) 을 I 와 E_a 의 평균으로 정의

$$\chi_M = \frac{1}{2}(I + E_a)$$

Pauling의 전기음성도 : Pauling은 서로다른 원자로 이루어진 분자에서
 bond enthalpy (bond energy) 는 거의 대부분 homonuclear
 분자의 bond enthalpy 보다 큼을 관찰. Pauling은 AB 분자의
 bond enthalpy 와 AA분자와 BB 분자의 bond enthalpy 의
 평균과의 차이를 ionic resonance energy 라고 하였다

$$(\text{ionic resonance energy} = B(A-B) - \frac{1}{2}(B(A-A) + B(B-B)))$$

ionic resonance energy 는 전기음성도의 차이로 부피 반영
 한다고 하였다. 그러므로 전기음성도의 차이를 다음과 같이 정의
 하였다.

$$| \chi_p(A) - \chi_p(B) | = 0.102 (\Delta / \text{kJ mol}^{-1})^{1/2}$$

$$\Delta = B(A-B) - \frac{1}{2} \{ B(A-A) + B(B-B) \}$$

Pauling의 전기음성도는 Milliken의 전기음성도와

$$\chi_p = 1.35 \chi_M^{1/2} - 1.37 \text{ 의 관계가 있다.}$$

() Allred-Rochow 전기음성도 : Allred와 Rochow는 원자의 표면에서 전자가
 느끼는 electric field의 세기에 의하여 전기음성도가 결정된다고 생각하였다.
 그러므로 Pauling의 전기음성도와 비교하여 전기음성도는 다음과 같이 주어졌다고
 하였다

$$\chi_{AR} = 0.744 + \frac{0.359 Z_{eff}}{(r/A)^2} \quad \text{여기서 } Z_{eff} \text{는 effective nuclear charge, } r \text{는 covalent radius.}$$

6 w

Gravitational force (만유인력) : 쿼크 (quark) 들이 뭉쳐서 중성자나

양성자나 중수소 (중성자 + 양성자)의 핵을 만드는 데에 작용.

[양성자는 쿼크로 이루어진 β -ray (e^- beam)이 나와서 β 선
 ${}^1_0\text{n} \rightarrow {}^1_1\text{H} + e^-$]

Strong force (강력) : 핵융합 과정에서 양성자와 양성자 사이의

강한 반발력을 극복하고 이들을 핵안이 붙잡아 주는 데에 작용.

Electromagnetic force (전자기력) : 양전하를 띤 핵이 전자를 당겨서

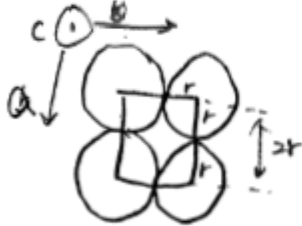
원자를 만드는 데에 작용

Weak force (약력) : ${}^{57}_{26}\text{Fe}$ 보다 무거운 핵의 핵융합과 관련 있음

즉 ${}^{57}_{26}\text{Fe}$ 보다 무거운 핵이 좀 더 가벼운 핵으로 붕괴 (Decay)

하는 데에 작용하는 힘이 약력이다.

7 primitive cube



• 구의 반지름은 r 이라 하면 단위 세포 한변의 길이는 $2r$.

• P_0 원자 1개의 질량 $m = 210 \text{ g} / 6.022 \times 10^{23} = 3.49 \times 10^{-25} \text{ kg}$

• Primitive cube 안에 있는 P_0 원자 (구)의 개수 = 1

$$\therefore P_0 \text{의 밀도 } d = \frac{\text{구 1개 질량}}{\text{단위 세포 부피}} = \frac{m}{(2r)^3}$$

$$= \frac{3.49 \times 10^{-25} \text{ kg}}{8r^3} = 9196 \text{ kg/m}^3$$

$$\therefore r = \left(\frac{3.49 \times 10^{-25} \text{ kg}}{8 \times 9196 \text{ kg/m}^3} \right)^{1/3} = 1.67 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.67 \text{ \AA}$$

(5)

8

(1) A: 1개 B: 1개 X: 3개

(2) Perovskite structure

(3) CaTiO_3

(4) Cubic-closed packing (CCP) = face-centered cubic (FCC)

(5) 배위수: 6, 배위구조: octahedral

(6) 단위세포의 모양: Cubic

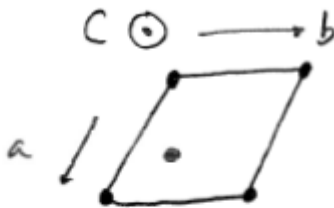
A: 각 꼭지점

B: cube의 중앙

X: 면의 중앙

9

10

 Co : HCP $(0\ 0\ 0)$ $(1\ 0\ 0)$ $(0\ 1\ 0)$ $(1\ 1\ 0)$ $(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{1}{2})$ $(0\ 0\ 1)$ $(1\ 0\ 1)$ $(0\ 1\ 1)$ $(1\ 1\ 1)$