

2004년도 교육대학원 무기화학및실험 기말고사 (2004년 6월 15일)

- 시험시간 7:00-10:00 PM
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 여러 가지 상수는 시험지의 끝 부분에 있음.
- 시험에서 주어지지 않은 상수가 있을 경우에는 질문하기 바람.

1. 다음표의 빈칸을 채우시오.

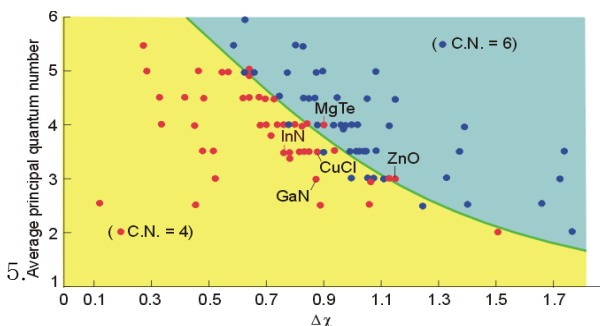
원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
27				
	Zn			
		Arsenic		
36				
	Sn			
		Thallium		

2. 수소원자 4개로 이루어진 가상의 직선 H_4 분자를 생각해 보자.

- H의 1s orbital 4개를 linear combination하여 만들 수 있는 MO는 몇 개 인가?
- (a)의 linear combination (MO) 들의 그림을 그리고 에너지 준위의 순서대로 정렬하라.

3. He 원자가 빛을 흡수하면 $1s^1 2s^1$ 전자배치를 가지는 excited state (He^*)가 된다. 이 He^* 는 다른 He와 만나서 $HeHe^*$ 의 이원자분자 (diatomic molecule)이 될 수 있다. $HeHe^*$ 의 MO의 에너지준위로부터 $HeHe^*$ 분자의 결합에 대하여 설명하여라.

4. 다음의 structure map과 전기음성도 값을 이용하여 (a) LiF, (b) RbBr, (c) SrS, (d) BeO 의 양이온과 음이온의 배위수는 어떻게 되는지 예측해 보아라.



원소	χ	원소	χ	원소	χ	원소	χ
Li	0.98	F	3.98	Rb	0.82	Br	2.96
Sr	0.82	S	2.58	Be	1.57	O	3.44

5. Lattice enthalpy를 이론적으로 계산하기 위하여서는 이온들 간의 두 가지의 주된 interaction을 고려하여야한다. 하나는 Coulombic interaction에 의한 것으로서 $V_{Coul} = AN_A e^2 z_A z_B / (4\pi\epsilon_0 d)$ 의 에너지로 주어지고 다른 하나는

전자간의 반발력에 의한 것으로서 $V_{rep} = N_A C' e^{-d/d^*}$ 로 주어진다. 여기서 A 는 Madelung constant, N_A 는 아보가드로의 수, e 는 전자의 전하량, z_A 와 z_B 는 각각 양이온과 음이온의 전하수, ϵ_0 는 vacuum permittivity, C' 는 물질에 따른 어떤 상수, d^* ($=0.345 \text{ \AA}$)는 compressibility, d 는 가장 가까운 양이온과 음이온 사이의 거리이다.

- Born-Mayer equation을 유도하라.
- KCl은 rock-salt 구조를 가진다. 만일 어떤 하나의 특정한 이온을 중심으로 하여 다섯 번 째로 가까운 이온까지만 고려하여 Madelung constant를 계산한다고 하면 그 값은?
- Rock-salt 구조의 Madelung constant는 1.748 이다. 다음의 data를 이용하여 K(g)의 이온화에너지를 구하여라.

$$d(K-Cl) = 4.05 \text{ \AA}$$

$$K(s) \text{의 sublimation: } \Delta H_{sub}^\circ = 89 \text{ kJ/mol}$$

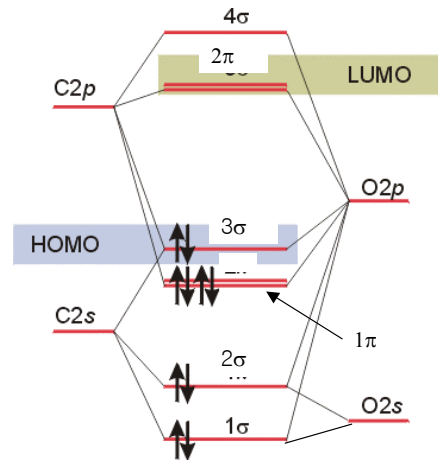
$$Cl_2(g) \text{의 dissociation: } \Delta H_{diss}^\circ = 244 \text{ kJ/mol}$$

$$Cl(g) \text{의 electron affinity: } E_a = 355 \text{ kJ/mol}$$

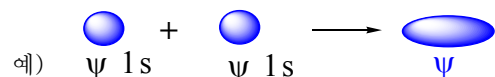
$$KCl(s) \text{의 formation: } \Delta H_{for}^\circ = -244 \text{ kJ/mol}$$

6. CO 분자에 대하여 다음에 답하라.

- Lewis 구조를 그려라.
- 각원소의 형식전하와 산화수를 써라.
- CO 분자의 MO 에너지 준위도는 다음과 같다. (이 분자에서 C-O 축이 z-축이다. 1π 와 2π 오비탈은 2중 축퇴되어 있다.)



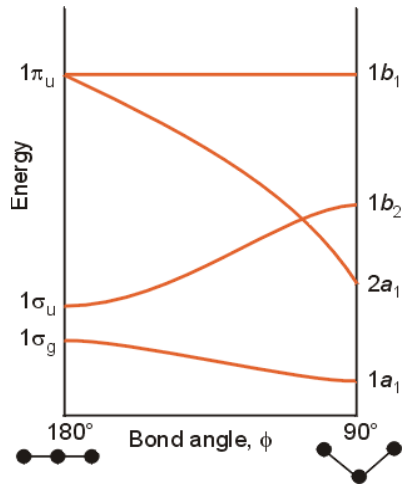
1π , 2π , 4σ 오비탈은 어떤 atomic orbital 끼리의 linear combination으로 만들어 지는지를 atomic orbital로부터 출발하여 MO가 만들어지는 과정을 그림으로 표시하라. atomic orbital과 MO의 이름을 정확히 쓰고 위상도 정확히 표시하라.



(d) 2π orbital은 실제의 경우 C orbital의 기여도가 크다. 이를 바탕으로 CO가 전이금속과 배위 결합을 할 때 소위 " π back-bonding"이라는 것을 할 수 있는데 이를 설명하여 보아라.

(e) CO의 전자배치를 써라.

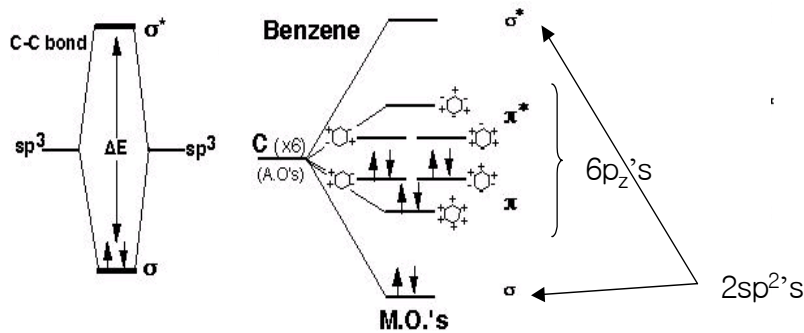
7. 다음의 Walsh diagram을 참조하여 풀어라.



(a) 기저상태 (ground state) NH_2 분자의 H-N-H 각도는 103° 이다. 전자배치를 써라.

(b) NH_2 의 first excited state의 전자 배치를 쓰고 그 때의 구조에 대하여 기저상태 NH_2 와 비교하여 논하라.

8. 다음은 C-C 단일결합에 대한 MO와 benzene의 MO에 대한 에너지 준위도이다. 이를 바탕으로 diamond는 절연체이나 graphite는 전도체인 사실을 band theory를 이용하여 설명하여라.



9. $\text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + e^-$ 변화에서 결합길이는 길어지는가 짧아지는가? O_2 의 MO

● 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 : $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$

Avogadro's number : $N_A = 6.022 \times 10^{23} / \text{mol}$

Gas constant : $R = 8.314 \text{ J/K} \cdot \text{mol}$

Rydberg constant : $R_H = 1.097 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$

Boltzman constant: $k = 8.614 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$