2010학년도 1학기 화학1 기말고사 (2010년 6월 18일)

이름:_____ 학번:_____ 학과:_____

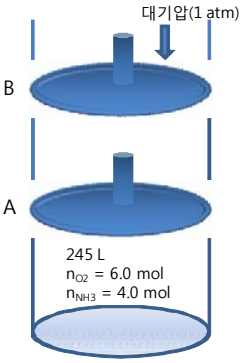
- 시험시간: 3:00 PM – 5:00 PM
- 휴대전화는 끌 것
- 지우개, 계산기는 서로 빌려줄 수 없음
- 답은 반드시 각 문제에 주어진 네모 안에 적을 것. 네모의 크기와 답의 길이는 상관관계가 없음
- 답의 단위가 주어졌을 경우 반드시 단위에 맞추어 답을 적을 것
- 각 문항에서 빈 공간이 있는 경우는 풀이 과정을 적으라는 의미임. 빈 공간의 크기와 풀이의 길이는 상관관계가 없음.
- 시험에 필요한 상수나 데이터는 맨 뒤에 있음.
- 문제수: 13
- Page 수: 4
- 만점: 265점

1. (10+20=30점) 질산을 공업적으로 만드는 방법인 Oswald 과정의 첫 단계는 암모니아를 일산화질소로 산화시키는 것이다.

$$4NH_3(g) + 5O_2(g) \rightarrow 4NO(g) + 6H_2O(g)$$

이 반응을 다음과 같은 용기(245 L, 피스톤의 위치 A)에 $NH_3(g)$ 4.0 mol과 $O_2(g)$ 6.0 mol을 넣고 반응시켰다. 반응이 완결된 후 내부에너지의 변화량(ΔE)을 구하여라.

- 피스톤은 대기압(1 atm)이 누르고 있고 자유롭게 움직일 수 있다.
- 용기는 단열재로서 외부로부터 열의 출입이 없고 용기의 열용량은 10.0 kJ/°C 이다.
- 반응이 완결 된 후 피스톤의 위치는 B로 바뀌는데 B는 A보다 위 또는 아래에 위치할 수 있다.
- 반응 전에 용기의 온도는 25 °C 이었다.
- NO는 N=O 이중결합으로 생각하여 풀 것



(a) 평균결합에너지를 이용하여 위 반응의 반응열을 구하여라.

	$4NH_3(g)$	$5O_2(g)$	$\rightarrow 4NO(g)$	$+ 6H_2O(g)$
반응전:	4.0 mol	6.0 mol	0 mol	0 mol
반응:	4.0 mol	5.0 mol		
생성:			4.0 mol	6.0 mol
반응후:	0 mol	1.0 mol	4.0 mol	6.0 mol

따라서 위 조건에서의 반응열(ΔH$_r$)은
ΔH$_r$ = 4D$_{NH3(g)}$ + 5D$_{O2(g)}$ – 4D$_{NO(g)}$ – 6D$_{H2O(g)}$
= 4x3xD(N–H) + 5xD(O=O) – 4xD(N=O) – 6x2D(O–H)
= 12(391) + 5(495) –4(607) –12(467) [kJ]
= –865 kJ

–865 kJ

(b) 내부에너지의 변화량(ΔE)을 구하여라.
ΔH$_r$ = –865 kJ 이므로 발열반응이고 이 열은 용기의 온도를 올리는 데 쓰였다. 용기의 열용량이 10.0 kJ/°C 이므로

Q = 865 kJ = C x ΔT
ΔT = 865 kJ / (10.0 kJ/°C) = 86.5 °C

따라서 용기의 최종 온도는 25 °C + 86.5 °C = 112 °C = 385 K

NH_3가 한계 시약이므로 반응 완결 후
NH_3 = 0 mol
O_2 = 1.0 mol
NO = 4.0 mol
H_2O = 6.0 mol 존재
반응이 완결된 후 용기 안에 있는 기체 전체 몰 수 = 11.0 mol 이므로

기체 전체의 부피(용기의 부피)는

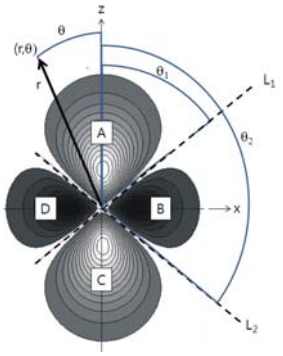
$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{11.0mol \times (0.0821L \cdot atm/K \cdot mol) \times 385K}{1atm} = 348L$$

따라서 내부에너지의 변화량(ΔE)은

ΔE = q + w
= q – PΔV
= –865 kJ – 1 atm x (348L – 245L)
= –865 kJ – 103.L · atm
(0.0821L · atm = 8.314J 이므로 L · atm = 101.3J)
= –865 kJ – 103x101.3 J = –865 kJ – 10.4 kJ
= –875 kJ

–875 kJ

2. (8+10+15=33점) 다음은 $3d_{z^2}$ 오비탈의 전자분포 모양을 xz 평면에 투영한 것이다.



(a) 주양자수(n), 각운동량양자수(l), 방사방향마디(radial node)의 개수, 각방향마디(angular node)의 개수, A, B, C, D 영역에서 오비탈의 위상을 적어라.

오비탈	n 값	l 값	radial node의 개수	angular node의 개수	A 영역에서의 위상	B 영역에서의 위상	C 영역에서의 위상	D 영역에서의 위상
$3d_{z^2}$	3	2	0	2	+	–	+	–

(b) 위 그림에서 점선 L_1과 L_2는 마디를 나타낸다. $3d_{z^2}$ 오비탈의 파동함수는 다음과 같이 주어진다.

$$\psi_{3d_{z^2}}(r,\theta) = Ar^2e^{-Br}(3\cos^2\theta - 1)$$

여기서 A와 B는 상수, r은 원점(핵)으로부터의 거리, θ는 z-축과의 각도(위 그림에서 화살표와 z-축 사이의 각도)를 나타낸다. 일정한 거리 r_0에서 전자가 발견될 확률이 가장 큰 각도는 몇 도(°) 인가?

$\psi_{3d_{z^2}}(r,\theta) = Ar^2e^{-Br}(3\cos^2\theta - 1)$
(r_0,θ)에서 전자가 발견될 확률은 $\psi^2_{3d_{z^2}}(r_0,\theta) = [Ar_0^2e^{-Br_0}]^2(3\cos^2\theta - 1)^2$
$\psi^2_{3d_{z^2}}(r_0,\theta)$ 값이 최대가 되기 위하여 $\cos^2\theta = 1$
따라서 $\theta = 0^o$(또는 180^0)

0°(또는 180°)

(c) z-축과 점선 L_1 사이의 각도(θ_1), z-축과 점선 L_2 사이의 각도(θ_2)를 구하여라.[답은 도(°)의 단위로 표시할 것. π = 3.14159]

점선 L_1과 L_2는 마디이므로 전자가 발견될 확률이 0인 선이다.

$\psi_{3d_z}(r,\theta) = Ar^2e^{-Br}(3\cos^2\theta - 1)$

마디에서 $\psi^2_{3d_z} = [Ar^2e^{-Br}]^2(3\cos^2\theta - 1)^2 = 0$

따라서 $(3\cos^2\theta - 1)^2 = 0$

$3\cos^2\theta = 1$

$\cos^2\theta = \frac{1}{3}$

$\cos\theta = \pm\sqrt{\frac{1}{3}}$

$\theta_1 = \arccos(\sqrt{\frac{1}{3}}) = 0.95531\ rad = 54.74^o$

$\theta_2 = \arccos(-\sqrt{\frac{1}{3}}) = 2.1863\ rad = 125.26^o$

θ_1	θ_2
54.74°	125.26°

3. (8점) 어떤 한 원자에서 다음의 양자수를 가질 수 있는 전자의 최대 개수는?

양자수	전자의 최대 개수
n = 3	18
n = 2, l = 0	2
n = 2, l = 2, m_l = 0	0
n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = 1/2	1

4. (8점) 다음의 원자는 바닥상태(ground state)에서 아래 표에 주어진 양자수를 가지고 있는 전자가 있는가, 없는가?

원자	양자수	전자의 존재 ('있다' 또는 '없다'로 표시)
B	n = 3	없다
Mg	n = 2, l = 0	있다
In	n = 2, l = 2, m_l = 0	없다
S	n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = 1/2	있다

5. (5+10+20=35점) O^{2-}, F^-, Na^+, Mg^{2+} 이온들은 등전자이온(isoelectronic ions)이다.

(a) 바닥상태 전자배치 써라.

$1s^22s^22p^6$

(b) 위 이온 중 이온 반경이 가장 큰 것은 어느 것 인가 쓰고, 그 이유를 설명하여라.

답	O^{2-}
설명	위 이온들은 모두 같은 수의 전자를 가지고 있다. 그 중에서 O^{2-}는 가장 적은 수의 양성자를 가지고 있으므로 전자와의 인력이 가장 작다. 따라서 이온 반경이 가장 크다.

(C) 위 이온 중 가장 작은 이온화에너지(위 이온에서 전자를 하나 더 떼기 위하여 필요한 에너지)를 가지고 있는 것은 어느 것 인가 써라. 그리고 그 이온을 빛을 쪼여 이온화 시킬 때, 이온화 시킬 수 있는 빛의 최대 파장은 몇 nm인가? (Z_{eff}는 양성자의 수로 생각하여 풀 것)

수소꼴 원자의 오비탈 에너지 준위는 $E_n = -2.178\times10^{-18}J(\frac{Z^2_{eff}}{n^2})$로 주어진다. 그런데 O^{2-}의 핵전하가 가장 작으므로 같은 주양자수 n에 대하여 O^{2-}의 오비탈 에너지 준위가 가장 높다. 따라서 O^{2-}의 이온화 에너지가 가장 작다.

O^{2-} 의 전자배치가 $1s^22s^22p^6$이므로 이온화 에너지는

$I = E_\infty - E_2 = 0 - (-2.178\times10^{-18}J)(\frac{8^2}{2^2}) = 3.485\times10^{-17}J$

$h\nu = h\frac{c}{\lambda} = 3.485\times10^{-17}J$

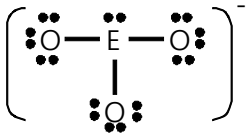
$\lambda = h\frac{c}{3.485\times10^{-17}J} = \frac{(6.62608\times10^{-34}J\cdot s)\times(2.998\times10^8 m/s)}{3.485\times10^{-17}J}$

$= 5.700\times10^{-9}m$

$= 5.700\,nm$

이온	O^{2-}	최대 파장	5.700 nm

6. (5+15+15=35점) E가 미지의 원자일 때, 다음의 루이스 구조를 가지는 이온이 있다.

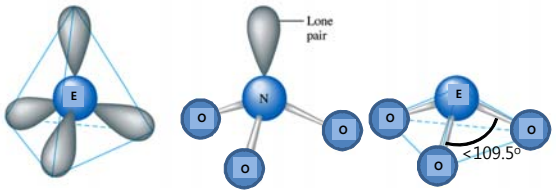


E는 어느 원자인가? E와 O의 형식전하는? E와 O의 산화수는? 위 이온의 구조를 원자가전자쌍반발(VSEPR) 모형을 바탕으로 자세히 설명하여라. 위 이온의 구조와 결합을 원자가결합이론(VBT)을 바탕으로 자세히 설명하여라.

E 원자	형식전하		산화수	
17족 원자 (F, Cl, Br, I)	E	+2	E	F(-1), 나머지(+5)
	O	-1	O	F(0), 나머지(-2)

VSEPR을 이용한 구조설명

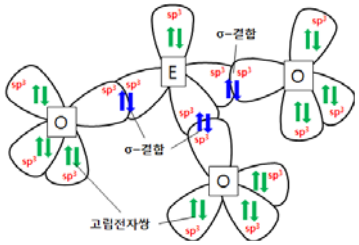
중심원자(E)는 전자쌍을 4개 가지고 있으므로 전자쌍 사이의 반발력을 최소화하기 위하여 E를 중심으로 전자쌍 4개가 정사면체 배열을 한다. 따라서 분자의 구조는 삼각피라미드 형태가 된다. 그런데 고립전자쌍-결합전자쌍 사이의 반발력이 결합전자쌍-결합전자쌍 사이의 반발력보다 크므로 O-E-O의 각도는 109.5° 보다 작게 된다.

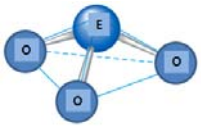


정사면체 삼각뿔(삼각피라미드)

VBT를 이용한 구조와 결합 설명

E는 주변에 4개의 전자쌍을, O도 주변에 4개의 전자쌍을 가지고 있으므로 E와 O원자는 각각 정사면체 배열을 하는 4개의 sp^3 혼성오비탈을 가진다. E의 sp^3 혼성오비탈 3개는 주변에 있는 3개 O의 sp^3 혼성오비탈과 중첩되어 σ-결합을 할 수 있게 된다. EO_3^- 이온은 모두 26개의 원자가전자(valence electron)을 가진다. 이중 아홉 쌍은 O원자의 sp^3 혼성오비탈에 들어가 고립전자쌍이 되고, 한 쌍은 E원자의 sp^3 혼성오비탈에 들어가 고립전자쌍이 된다. 나머지 세 쌍은 E의 sp^3 혼성오비탈과 O의 sp^3 혼성오비탈과 중첩되어 만들어진 오비탈에 들어가 σ-결합을 하게 한다. 따라서 EO_3^- 이온의 전체적인 구조는 중심원자인 E의 혼성오비탈 배열에 의존하게 되어 삼각뿔(삼각피라미드)의 모양이 된다.



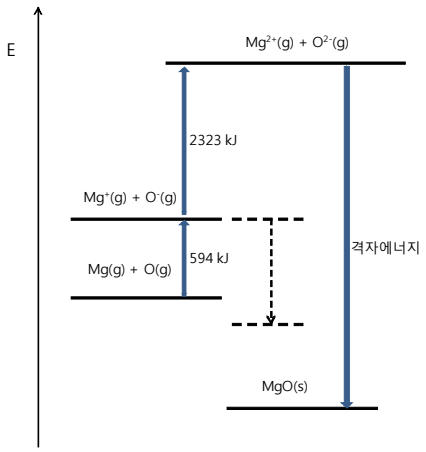


삼각뿔(삼각피라미드)

7. (20점) 다음은 Mg의 1차, 2차 이온화에너지, O의 1차, 2차 전자친화도이다.

과정	ΔH(kJ/mol)
$Mg(g) \rightarrow Mg^+(g) + e^-$	735
$Mg^+(g) \rightarrow Mg^{2+}(g) + e^-$	1445
$O(g) + e^- \rightarrow O^-(g)$	-141
$O^-(g) + e^- \rightarrow O^{2-}(g)$	878

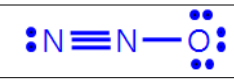
산화마그네슘은 Mg^+O^-로 존재하는 것이 아니라 $Mg^{2+}O^{2-}$로 존재한다. $Mg(g) + O(g) \rightarrow Mg^+(g) + O^-(g) \rightarrow Mg^{2+}(g) + O^{2-}(g) \rightarrow MgO(s)[= Mg^{2+}O^{2-}]$ 과정에 대한 에너지 변화를 준위도로 그리고 $Mg^{2+}O^{2-}$로 존재하는 이유를 설명하여라.



Mg(g)+O(g)에서 MgO(s)가 만들어지는 과정에서 $Mg^{2+}(g)+O^{2-}(g)$의 상태는 $Mg^+(g)+O^-(g)$의 상태보다 더 높은 에너지 준위를 가진다. 그런데 양이온과 음이온이 만나 이온화합물을 만들 때 격자에너지(= $k(\frac{Q_+Q_-}{r})$)는 양이온의 전하수(Q_+)와 음이온의 전하수(Q_-)의 곱에 비례한다. 따라서 $Mg^{2+}(g)+O^{2-}(g) \rightarrow MgO(s)[=Mg^{2+}O^{2-}]$과정의의 격자에너지가 $Mg^+(g)+O^-(g) \rightarrow MgO(s)[=Mg^+O^-]$과정의의 격자에너지보다 훨씬 큰 값을 가지게 되어 $MgO(s)[=Mg^{2+}O^{2-}]$가 $MgO(s)[=Mg^+O^-]$보다 안정하게 된다.

8. (5+9=14점) N_2O는 선형, 극성 분자이다.

(a) N_2O의 구조와 성격을 설명할 수 있는 루이스 구조를 그려라.

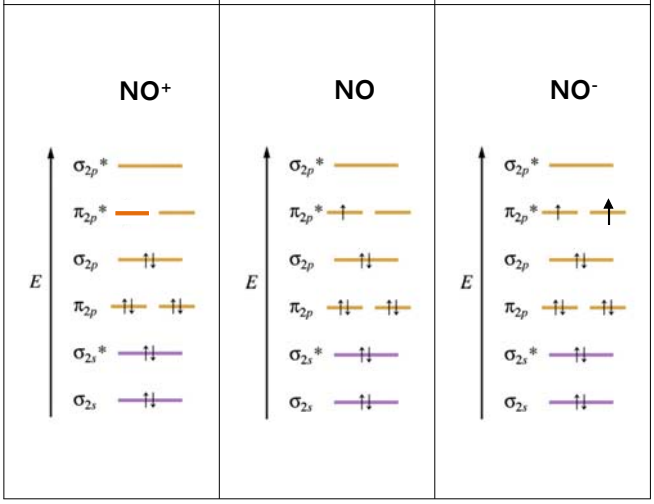


(b) N_2O에서 두 개의 N에 형성되는 혼성오비탈과 O에 형성되는 혼성오비탈을 적어라.

원자	N1	N2	O
혼성오비탈	sp	sp	sp^3

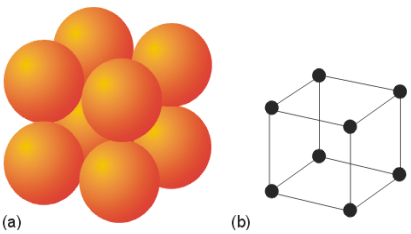
9. (15+6=21점) NO^+, NO, NO^- 에 대하여 각각 분자궤도함수의 에너지 준위 그림을 그리고 전자배치를 화살표를 이용하여 표시하라.(궤도함수의 이름도 정확히 써라.) 각 화학종의 결합 차수를 계산하여라. 어떤 화학종이 상자기성인가?

분자궤도함수의 에너지 준위 그림

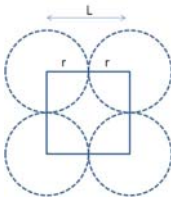


	NO^+	NO	NO^-
결합차수	3	2.5	2
상자기성(O, X로 표시)	X	O	O

10. (10+20=30점) 폴로니움 (Po)은 단순입방격자 (simple cubic)의 결정 구조를 가지고 있고 밀도가 9.196g/cm^3 이다. 아래의 그림은 simple cubic의 단위세포 (unit cell) 이다.



(a) 구가 단위세포 안에서 최대로 차지할 수 있는 부피는 단위세포 부피의 몇 %인가?



구의 반경을 r, 단위세포 한 변의 길이를 L이라고 하면 L=2r.
단위세포 안에 있는 구의 개수 = 8 x (1/8) =1
단위세포의 부피 = $L^3 = (2r)^3 = 8r^3$
구의 부피 = $(4/3)\pi r^3$
따라서 구가 차지하는 비율 = $(4/3)\pi r^3/8r^3 = (4/3)\pi/8 = \pi/6 = 0.52$
= 52%

52 %

(b) Po 원자를 구라고 하였을 때 Po 원자의 반경 몇 m 인가?

단위세포 하나에 Po 원자가 하나 있으므로
Po의 밀도 = Po 하나의 질량/단위세포의 부피

$$= \frac{\frac{210\,g/mol}{6.022\times10^{23}/mol}}{8r^3} = \frac{4.36\times10^{-23}g}{r^3} = 9.196\ g/cm^3$$

$$r = \left(\frac{4.36\times10^{-23}g}{9.196\,g/cm^3}\right)^{\frac{1}{3}} = 1.68 \times 10^{-8}\ cm = 1.68 \times 10^{-10}\ m$$

1.68×10^{-10} m

11. (8+15=23점) 45°C에서 물(H_2O)의 증기압은 71.9 torr 이고 프로판올($CH_3CH_2CH_2OH$)의 증기압은 74.0 torr 이다.

(a) 만일 물-프로판올 혼합용액이 이상용액이라면 물 9g과 프로판올 30g을 섞은 혼합용액의 증기압은 얼마인가?

물의 몰질량 = 2 x 1 g/mol +16 g/mol = 18 g/mol
프로판올의 몰질량 = 8 x 1 g/mol +16 g/mol +3 x 12 g/mol = 60 g/mol
물의 몰 수 = 9 g/ (18 g/mol) = 0.5 mol
프로판올의 몰 수 = 30 g/ (60 g/mol) = 0.5 mol
혼합용액 전체 몰 수 = 0.5 mol + 0.5 mol = 1.0 mol
물의 몰 분률 = 0.5
프로판올의 몰 분률 = 0.5
혼합용액의 증기압 = 0.5 x 71.9 torr + 0.5 x 74.0 torr = 73.0 torr

73.0 torr

(b) 물 9g과 프로판올 30g을 섞은 혼합 용액의 증기압을 측정하여 보니 81.2 torr 였다. 물-프로판올 혼합 용액의 ΔH_{soln}(용해열)의 부호가 어떻게 되는지 예측하고 그 이유를 물-프로판올사이의 인력, 순수한 물질 사이의 인력과 연관지어 설명하여라.

ΔH_{soln}의 부호: 양수(+)
설명: 물-프로판올 혼합용액이 이상용액이라면 혼합용액의 증기압은 73.0 torr가 되어야 한다. 그런데 실제 증기압은 81.2 torr 로서 이상용액으로 생각했을 때 보다 더 크다. 이는 '물-물 사이의 인력> 프로판올-프로판올 사이의 인력> 물-프로판올 사이의 인력'을 의미한다. (순수한 물의 증기압이 프로판올의 증기압보다 크므로 '물-물 사이의 인력> 프로판올-프로판올 사이의 인력' 이다.) 즉 물과 프로판올은 서로 섞이는 것 보다 순수한 상태로 있는 것이 에너지 상태가 낮다. 따라서 용해열(ΔH_{soln})은 양수이다.

12. (8점) 다음 여러 물질 중 주어진 성질에 적합한 하나를 골라라.

	답
HBr, Kr, Cl_2: 가장 높은 끓는점	HBr
H_2O, NaCl, HF: 가장 높은 어는점	NaCl
N_2, CO, CO_2: 가장 낮은 어는점	N_2
HF, HBr, HCl: 가장 높은 끓는점	HF

13. (20점) 폼산(HCO_2H)은 수용액에서 부분적으로만 해리되는 단일 양성자산이다. 0.10 M 폼산 용액은 4.2 %가 이온화 된다. 용액의 몰농도와 몰랄농도가 같다고 가정하고, 0.10 M 폼산 용액의 어는점과 끓는점을 계산하여라.

	HCO_2H	$\rightleftarrows$	HCO_2^-	+	H^+
처음	0.10 M		0		0
해리	−0.0042 M		0.0042 M		0.0042 M
나중	≃ 0.10 M		0.0042 M		0.0042 M

따라서 용질의 전체 몰 농도 = 0.10 + 0.0042 + 0.0042 = 0.11 M
몰농도와 몰랄농도가 같다고 가정
=> 0.11 M (mol/L) ≃ 0.11 molal (mol/kg)

어는점 내림 = $\Delta T = K_f m$ = 1.86 °C · Kg/mol x 0.11 mol/kg = 0.20 °C
끓는점 오림 = $\Delta T = K_b m$ = 0.51 °C · Kg/mol x 0.11 mol/kg = 0.056 °C

따라서

어는점 = 0 °C − 0.20 °C = −0.20 °C
끓는점 = 100 °C + 0.056 °C = 100.056 °C

%% 계산에 따라 용질의 전체 몰 농도가 0.10 M 이 나올 수도 있음.
그 경우 어는점 = −0.19 °C, 끓는점 = 100.051 °C 가 되어야 함 %%

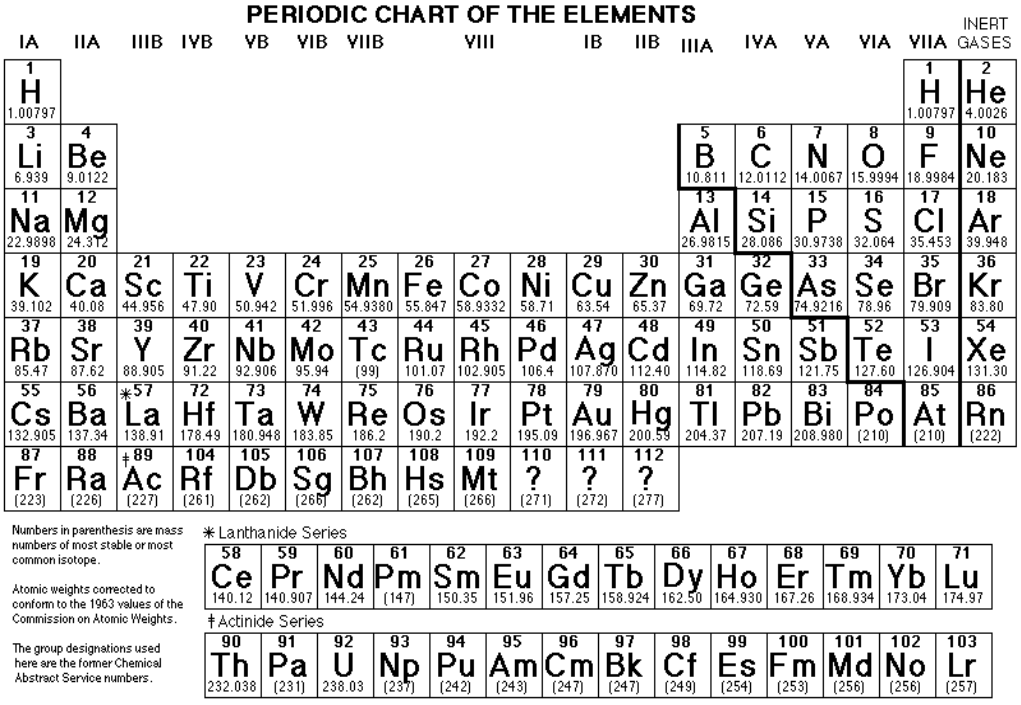
어는점	−0.20 °C
끓는점	100.056 °C

- 기말고사 점수는 http://bh.knu.ac.kr/~leehi에 공고될 것임.

- 1 atm=760 mmHg=760 torr=1.01325 x 10^5 Pa = 1.01325 x 10^5 N/m^2
- R (기체상수) = 0.0821 L•atm/(mol•K) = 8.314 J/(mol•K)
- 수소꼴 원자에서의 전자 오비탈 에너지 준위: $E_n = -2.178 \times 10^{-18} J(\frac{Z_{eff}^2}{n^2})$ (n=1,2,..)
- h (Planck constant) = 6.62608 x 10^{-34} J•s
- c (광속) = 2.998 x 10^8 m/s (ν = 주파수, λ= 파장)
- 평균결합에너지

TABLE 8.4 Average Bond Energies (kJ/mol)

Single Bonds						Multiple Bonds	
H—H	432	N—H	391	I—I	149	C=C	614
H—F	565	N—N	160	I—Cl	208	C≡C	839
H—Cl	427	N—F	272	I—Br	175	O=O	495
H—Br	363	N—Cl	200			C=O*	745
H—I	295	N—Br	243	S—H	347	C≡O	1072
		N—O	201	S—F	327	N=O	607
C—H	413	O—H	467	S—Cl	253	N=N	418
C—C	347	O—O	146	S—Br	218	N≡N	941
C—N	305	O—F	190	S—S	266	C≡N	891
C—O	358	O—Cl	203			C=N	615
C—F	485	O—I	234	Si—Si	340		
C—Cl	339			Si—H	393		
C—Br	276	F—F	154	Si—C	360		
C—I	240	F—Cl	253	Si—O	452		
C—S	259	F—Br	237				
		Cl—Cl	239				
		Cl—Br	218				
		Br—Br	193				

*C=O(CO_2) = 799

- k_f(물의 어느점 내림 상수) = 1.86°C · Kg/mol
- k_b(물의 끓는점 오름 상수) = 0.51°C · Kg/mol
- 주기율표