

2002년도 무기화학1 중간고사 (295)
 기말
 시험시간 12시 까지.
 시험을 마친 학생은 답지를 제출하고 교실 밖으로
 나가도 좋으나 12시에 다시 들어오기 바람.

1. 원자 번호 1번에서 109번까지 원소 기호와 원소
 이름을 써라. (50)

2. 다음 각 물질에서 각 원소의 산화수는? (25)

(a) KCl (b) O_2 (c) NO_3^- (d) H_2O_2 (e) NH_3

3. CH_4 에 대하여 다음에 답하라. (120)

(a) Lewis 점구조식을 그려라.

(b) VSEPR model에 따른 구조를 그리고
 설명하여라.

(c) Valence Bond Theory 에 근거한 C-H
 σ -bond를 설명하여라.

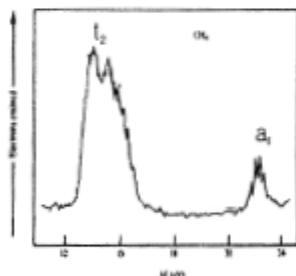
(d) point group은?

(e) 몇 개의 fundamental vibrational mode가
 있는가?

(f) 위의 각 mode들의 symmetry type은?

(g) IR active한 mode는? Raman active한
 mode는?

다음 그림은 CH_4 의 photoelectron spectrum이다.



CH_4 는 수소의 1s 오비탈 (4개)과 탄소의 2s, 2p
 오비탈로 molecular orbital을 만든다.

(h) 수소의 4개의 1s 오비탈에 대한 reducible
 representation (Γ) 은?

(i) Γ 를 irreducible representation들의 linear
 combination으로 표시하라.

(j) 탄소의 2s 오비탈의 symmetry type은?

(k) 탄소의 2p 오비탈들의 symmetry type은?

(l) CH_4 의 molecular orbital의 에너지 준위도를
 그려라. (H의 1s 그리고 C의 2s, 2p와의 관계도

표시, 위의 spectrum 참조)

(m) 위의 spectrum은 어느 orbital에 있는 전자가
 어디로 전이할 때의 에너지를 나타낸 것인가?

(n) 위의 spectrum을 VB Theory로 설명 가능한가
 불가능 한가? 그 이유는?

4. 다음의 point group은?

(a) Fevernova (2002 월드컵 공식 축구공) (30)

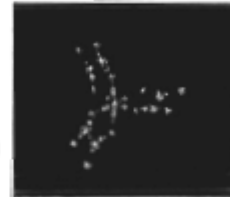


앞에서 본 그림

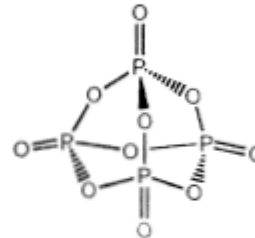
뒤에서 본 그림

(b) BF_3 (c) B_2H_6

(d) $[Cr(ox)_3]^{-3}$



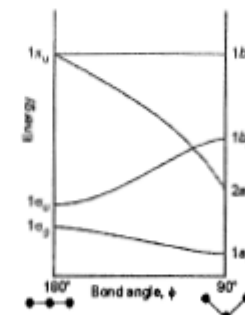
(e) H_2O_2 (skew form)



(f) $P_4O_{10}^{-4}$

5. 뒷장을 읽고 문제 4의 (a), (e), (f) 분자나 이온
 (Fevernova도 분자라고 가정)에 있어서 polarity와
 chirality가 있는가의 여부를 밝혀라. (15)

6. 다음의 XH_2 ($X=B, Be, C, N, O$) 분자에 대한
 Walsh diagram을 보고 답하라. (30)



(a) BH_2 는 어떠한 구조를 가질지 예측해 보고
 electron configuration을 써라.

(b) BH_2^+ 는 어떠한 구조를 가질지 예측해 보고
 electron configuration을 써라.

(c) BH_2^- 는 어떠한 구조를 가질지 예측해 보고
 electron configuration을 써라.

(25)
 7. (a) CH_4 를 연소시켰을 때의 균형잡힌 반응식을
 써라.

(b) 다음은 mean bond enthalphy의 데이터이다.
 이로부터 위 반응의 반응 엔탈피 (CH_4 의 연소열)를

구하여라.

표. mean bond enthalpies (kJmol^{-1})

	H	C	O
H	436		
C	412	348(1) 612(2) 890(3)	
O	463	360(1) 743(2)	146(1) 497(2)

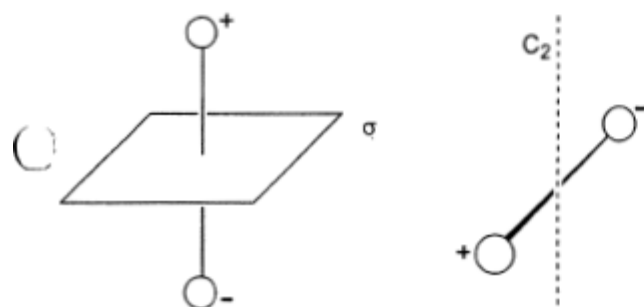
*** In the final lecture of the course, there was not wrong-presentation but some mis-presentation of the application of symmetry to polarity (and chirality), which might confuse students. Following is the summary of the part.

Applications of symmetry

1. Molecular polarity

- Polar molecule: a molecule with a permanent electric dipole moment.
- A molecule with a center of inversion (i) cannot have a permanent dipole.
- A molecule cannot have a permanent dipole perpendicular to any mirror plane.
- A molecule cannot have a permanent dipole perpendicular to any axis of symmetry.
- A molecule cannot have a permanent dipole perpendicular to any axis of symmetry.

Therefore, molecules having both a C_n axis and a perpendicular C_2 axis or σ_h cannot have a dipole in any direction. $\Rightarrow$ Molecules belonging to any D, T, O or I groups cannot have permanent dipole moment.



The presence of a mirror plane or a C_2 axis rules out a dipole in the direction shown.

2. Molecular chirality

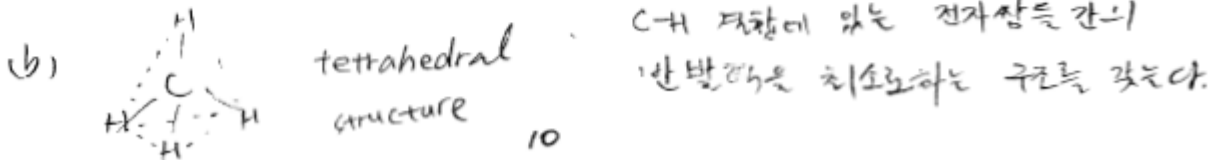
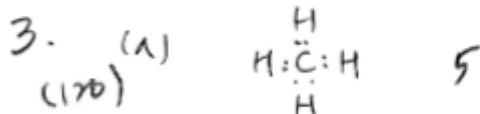
A chiral molecule is a molecule that is distinguished from its mirror image in the same way that left and right hands are distinguishable.

A molecule that has no axis of improper rotation (S_n) is chiral.

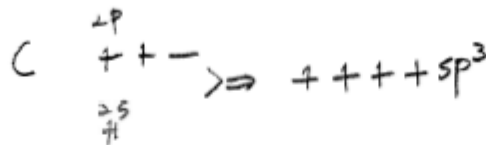
S_n : including $S_1 = \sigma$ and $S_2 = i$

1. (50)

- ... (25) (a) K : +1 ^{다 맞아야} Cl : -1 5
 (b) O : 0 5
 (c) N : +5 O : -2 5 (d) H : +1 O : -1 5
 (e) N : -3 H : +1 5



- (c) C = 1 valence에 있는 3개의 2p orbitals과 1개의 2s orbital이 4개의 sp^3 혼성 orbitals을 만든다.

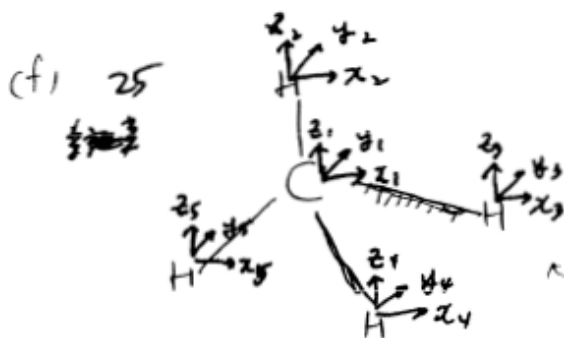


C의 sp^3 orbital과 H의 1s orbital이 overlap하여 각 orbital에 있는 하나의 전자가 pair를 이루어 σ -bond를 형성한다



(d) 5 T_d

(e) 5 $3N - 6 = 3 \times 5 - 6 = 9$



3, 2, 1, 0, 1, 2, 3
y는 중심을 돌고 움직이는 방향

total degree of freedom = 15

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
Γ	15	0	-1	-1	3

little orthogonality there are...

10

$$A_1 \Rightarrow \frac{1}{24} (1 \times 15 + 8 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times (-1) + 6 \times 1 \times (-1) + 6 \times 1 \times 3)$$

$$= \frac{1}{24} (15 + 0 - 3 - 6 + 18) = 1$$

$$A_2 \Rightarrow \frac{1}{24} (15 + 0 - 3 + 6 - 18) = 0$$

$$E \Rightarrow \frac{1}{24} (1 \times 2 \times 15 + 0 + 3 \times 2 \times (-1) + 0 + 0) = 1$$

$$T_1 \Rightarrow \frac{1}{24} (1 \times 3 \times 15 + 0 + 3 - 6 - 18) = 1$$

$$T_2 \Rightarrow \frac{1}{24} (1 \times 3 \times 15 + 0 + 3 + 6 + 18) = 3$$

$$\therefore \Gamma = A_1 + E + T_1 + 3T_2 \leftarrow \text{total degeneracy (degree of freedom)} \quad 10$$

Translation: T_2

Rotation: T_1

$\therefore$ Fundamental vibrational modes, Γ_v

$$\boxed{\Gamma_v = A_1 + E + 2T_2}$$

15

(g) $\bullet$ A_1 : Raman active
 $\bullet$ E : Raman active
 $\bullet$ T_2 : Raman active, IR active } of $\frac{1}{2}$ to F 5

d)



T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
Γ_a	4	1	0	0	2

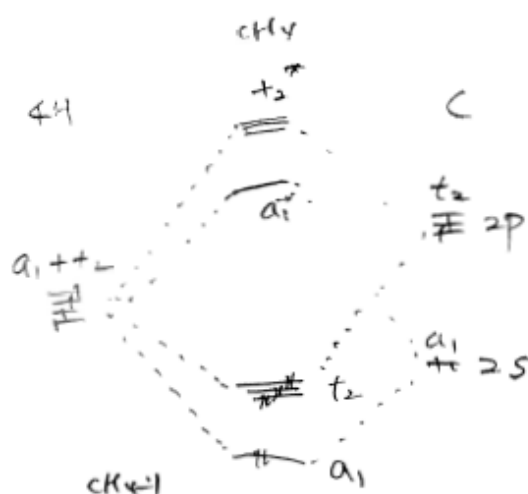
10

(i) $\Gamma = A_1 + T_2$ 5

(j) $A_1 \leftarrow C-H \text{ } 2s$ 5

(k) $T_2 \leftarrow C-H \text{ } 2p$ 5

(l)



10

(m) t_2 : t_2 orbital 이 있는 전자가 무한대

a_1 : a_1 " " 10

(n) $\frac{1}{2}$ 가: VB 이 의하면 C-H 의 결합 에너지가 전부 동등한 에너지 level 을 갖는다. 그러나 spectrum 을 보면 4 가지의 ionization energy 가 존재한다. $\therefore$ 전이불가능. (4가)

10

4. (30) (a) D_3 5

(b) D_{3h} 5

(c) D_{2h} 5

(d) D_3 5

(e) C_2 5

(f) T_d 5

5. (15) (a) polarity: X, chirality: 0 5

(e) polarity: 0, chirality: 0 5

(f) polarity: X, chirality: X 5

6. (a) BH_2 : $5+1=6$ valence electron

(2p)

$\therefore$ bent

10

electron configuration : $(1a_1)^2 (1b_2)^2 (2a_1)^1$

(b) BH_2^+ : $5+1=6$ valence electron

10

$\therefore$ linear

electron configuration : $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2$

(c) BH_2^- : $5+1+1=7$ valence electron

10

$\therefore$ bent

electron configuration : $(1a_1)^2 (1b_2)^2 (2a_1)^2$

7. (25)

(a)



10

(b)

std enthalpy, ΔH

$$\Delta H = 2 \underset{CO_2}{B(C=O)} + 2 \times 2 \underset{H_2O}{B(H-O)} - 4 \underset{CH_4}{B(C-H)} - 2 \times \underset{O_2}{B(O=O)}$$

$$= 2 \times 143 + 2 \times 2 \times 463 - 4 \times 412 - 2 \times 497$$

$$= 696 \text{ (KJ/mol)}$$

15