

1. 다음표의 빈칸을 채우시오.

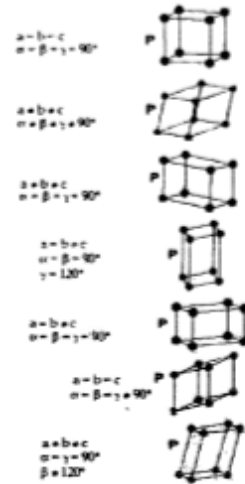
48

원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
9				
	Se			
		Krypton		
62				
	Tb			
		Holmium		

2. 수소물 원자에서

30

- (1) d_{xy} 오비탈에서 xy 라고 하는 표시는 어떻게 결정되었는지 설명하라.
- (2) $3d_{xy}$ 오비탈의 radial node, angular node, 전체 node의 수를 적고 xy 평면에 투사 (projection)한 그림을 그려라. (node를 정확히 표시하라. 선으로) 투사한 그림에서 위상 (+, -)을 정확히 표시하라.
- (3) $5d_{xy}$ 오비탈의 radial node, angular node, 전체 node의 수를 적고 xy 평면에 투사 (projection)한 그림을 그려라. (node를 정확히 표시하라. 선으로) 투사한 그림에서 위상 (+, -)을 정확히 표시하라.

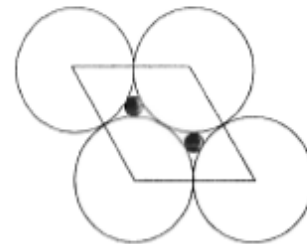


30

7. TiO_2 (Rutile) 구조에 대하여

- (1) unit cell을 그려라.
- (2) 양이온만을 볼 때의 구조는?
- (3) 음이온만을 볼 때의 구조는?
- (4) 양이온의 배위수는?
- (5) 음이온의 배위수는?

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



- (1) 이 이온화합물의 조성식은 (A_nB_m)?
- (2) 양이온과 음이온의 배위수는?
- (3) 이 2차원 이온고체에서 양이온과 음이온이 그림과 같이 접촉되어 있고 음이온끼리도 접촉하고 있다면 양이온의 반경은 음이온 반경의 몇 배인가?

9. 다음의 변화의 엔탈피 값으로부터 $KCl(s)$ 의 격자에너지를 구하라. (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

40

10. 9의 구조에서 Madelung constant를 구하는 식을 써 보아라. (음이온의 전하는 $-Z_{Se}$, 양이온의 전하는 $+Z_{Ae}$ 라고 하여라.) 하나의 음이온을 중심으로 생각하고 거기에서부터 두 번째 음이온까지 내의 음이온과 양이온을 생각하여라.

3. (1) 수소를 가열하면 특정한 주파수의 빛들이 나온다. 여러 실험 결과를 종합하면 그 빛들의 주파수는 다음과 같다.

$$\nu = R_H(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

$$n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_2 (>n_1) = 2, 3, 4, \dots$$

$$R_H = \text{Rydberg constant}$$

- 러더포드 (Rutherford)의 원자 모델에서는 이들 주파수를 설명하기가 어렵다. 러더포드 모델의 문제점을 지적하라.
- (2) (1)의 주파수를 설명하기 위한 보어 (Bohr)는 어떠한 원자론을 제시하였는지 설명하여라.
 - (3) 보어의 원자론으로부터 수소원자의 에너지 준위식을 유도하고 위의 수소 스펙트럼을 설명하여라.

4. 58.4 nm의 빛을 Krypton에 쏘이면 1.59×10^6 m/s의 속도를 갖는 전자가 튀어나온다. 같은 빛을 Rubidium에 쏘이면 2.45×10^6 m/s의 속도를 갖는 전자가 튀어나온다. Krypton과 Rubidium의 이온화에너지를 구하라. (eV 단위로)

5. 인 (P, 원자번호=15)과 황 (S, 원자번호=16) 사이에 관측되는 제일 이온화 에너지의 감소를 설명하여라.

6. 아래의 그림은 고체의 구조에서 7가지 crystal class들의 primitive unit cell의 격자점과 dimension을 표시한 것이다. 위에서부터 아래로 crystal class의 이름을 적어

1

48

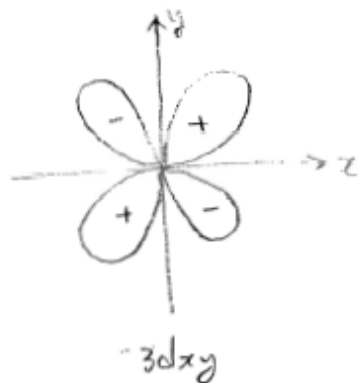
$$2 \times 4 \times 6 = 48$$

원자번호	원소기호	이름	주기	족
9	F	fluorine	2	17 (7A)
34	Se	selenium	4	16 (6A)
36	Kr	Krypton	4	18 (8A)
62	Sm	Samarium	6	Lanthanide (f-block)
65	Tb	Terbium	6	"
67	Ho	Holmium	6	"

2

(1)

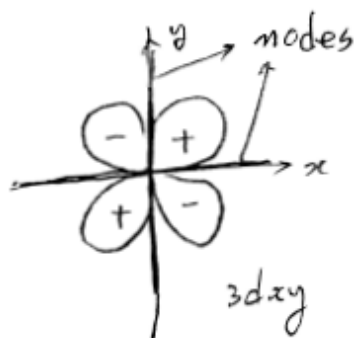
3D



angle-dependent wavefunction
4개의 로브를 가진 dxy orbital 이 1개
(wavefunction의 부호)에 xy 평면에서
xy축에 수직인 방향에 있다

10

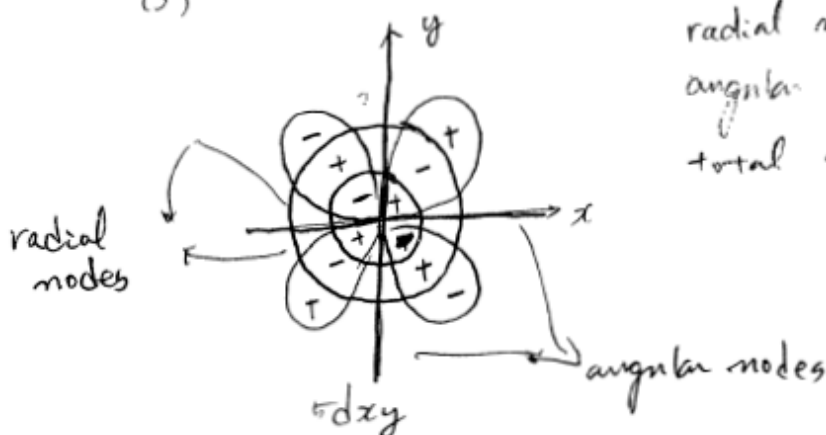
(2)



radial mode : 0
angular mode : 2
total mode : 2

10

(3)



radial mode : 2
angular mode : 2
total mode : 4

10

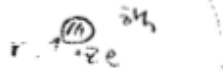
3

(1) Rutherford의 원자 모형

30

← e^- 전자

원자핵은 양성자와 중성자로 이루어져 있다.
전자는 원자핵 주위를 돌고 있다.
원자핵은 양전하를 띠고 있다.



Rutherford 원자의 total energy = K.E + P.E

$$= \frac{1}{2} m_p v_p^2 + \frac{1}{2} m_e v_e^2 + \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$\therefore$ 원자의 ground state energy는 $r \rightarrow 0$ 일 때 $-\infty$ 이다. 따라서, 전자는 핵으로 떨어지거나 하는 $-\infty$ 의 energy를 극복할 수 없으므로 원자는 어떠한 자유로도 있을 수 없다.

m_p : 핵의 질량
 v_p : " 속도
 m_e : 전자의 질량
 v_e : " 속도

$-\infty$ 이다. 따라서, 전자는 핵으로 떨어지거나 하는 $-\infty$ 의 energy를 극복할 수 없으므로 원자는 어떠한 자유로도 있을 수 없다.



Rutherford 원자의 문제점

X $h\nu$

15

(2) Bohr의 원자론

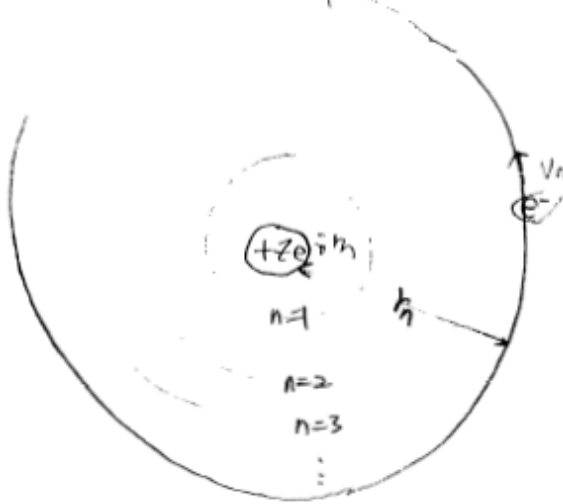
1. 원자는 잘 정의된 전자의 궤도를 가지고 있다. (원형 궤도)
2. 전자의 궤도 운동에서는 빛이 나오지 않는다.
3. 전자가 원형 궤도를 돌 때는 특정한 각운동량 ($l = nh$, $n=1, 2, \dots$)을 갖는다.
4. 전자가 하나의 궤도에서 다른 궤도로 전이할 때 빛을 내거나 흡수 한다.

15

[3] (cont'd)

[3]

(3) Bohr의 원자 모델



$E_n = \text{Kinetic Energy} + \text{Potential Energy}$

$$= \frac{1}{2} m_e v_n^2 - \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_n} \quad \dots \textcircled{1}$$

전자가 원자핵체로든 중심을 찌를 때, 원심력 = 구심력 이므로

$$\frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_n^2}$$

$$\therefore \frac{1}{2} m_e v_n^2 = \frac{Z e^2}{8 \pi \epsilon_0 r_n} \quad \dots \textcircled{2} \rightarrow \textcircled{1}$$

$$\therefore E_n = - \frac{Z e^2}{8 \pi \epsilon_0 r_n} \quad \dots \textcircled{3}$$

← Bohr의 원자 모델

$$\textcircled{2} \text{ or } m_e v_n = m h \quad \therefore v_n = \frac{n h}{2 \pi m_e r_n}$$

$$r_n = \frac{4 \pi \epsilon_0 m_e v_n^2}{Z e^2} = \frac{4 \pi \epsilon_0 m_e \cdot \frac{n^2 h^2}{4 \pi^2 m_e^2}}{Z e^2} = \frac{\epsilon_0 n^2 h^2}{\pi m_e Z e^2} \rightarrow \textcircled{3}$$

$$\therefore E_n = - \frac{Z^2 e^4 m_e}{8 \epsilon_0^2 n^2 h^2}$$

$$= - \frac{Z^2 R_H}{n^2} \quad (R_H = \frac{e^4 m_e}{8 \epsilon_0^2 h^2} : \text{Rydberg constant})$$

40의 경우 $Z=1$

4

$$E_n = -\frac{R_H}{n^2}$$

전자가 n_2 궤도에서 n_1 궤도로 떨어질 때 $n_2 > n_1$

$$\Delta E = -\frac{R_H}{n_2^2} + \frac{R_H}{n_1^2} = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$\lambda = \frac{\Delta E}{h} = \frac{R_H}{h} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 1 \text{ 빛의 속도}$$

$$\text{or } \left(R_H \equiv \frac{e^4 m_e}{8 \epsilon_0 h^2} \approx 13.6 \text{ eV} \right)$$

$$\lambda = R_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = 1 \text{ 빛의 속도}$$

25

4

20

$$h\nu = I.E + K.E$$

$$\therefore I.E = h\nu - K.E$$

$$= h \frac{c}{\lambda} - \frac{1}{2} m_e v^2$$

For Kr

$$I.E = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} \times 2.997 \times 10^8 \text{ m/s}}{58.4 \times 10^{-9} \text{ m}} - \frac{1}{2} \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.59 \times 10^6 \text{ m/s})^2$$

$$= 3.40 \times 10^{-18} \text{ J} - 1.15 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (1 \text{ J} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}^2)$$

$$= 2.25 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J})$$

$$= \underline{14.0 \text{ eV}}$$

10

For Rb

$$I.E = 3.40 \times 10^{-18} \text{ J} - \frac{1}{2} \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2.45 \times 10^6 \text{ m/s})^2$$

$$= 3.40 \times 10^{-18} \text{ J} - 2.73 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$= 6.67 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$= \underline{4.16 \text{ eV}}$$

10

5

15

P의 전자 배치

$3p^2$... $2s^2, 2p^4, 3s^1$

$3p \uparrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow \uparrow -$
$3s \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow$
$2p \uparrow\uparrow \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow \uparrow\uparrow$
$2s \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow$
$1s \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow$

S의 전자 배치

S^+ 의 전자 배치

$3p \uparrow\uparrow \uparrow \uparrow$	$\uparrow \uparrow \uparrow$
$3s \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow$
$2p \uparrow\uparrow \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow \uparrow\uparrow$
$2s \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow$
$1s \uparrow\uparrow$	$\uparrow\uparrow$

S의 하나의 3p orbital에는 두개의 전자가 들어감 이틀 사이의 반발 때문
 Polm S의 한 전자 증가를 상쇄하여 쉽게 전자 하나를 떼어낼 수 있다
 또한 S^+ 의 3p orbital은 half-filled 가 되어 이온화 에너지가 감소의
 요인을 준다. 15

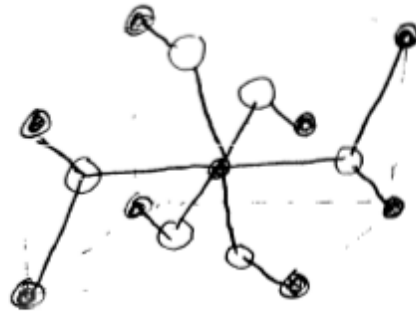
16

28

cubic	등방 결정
triclinic	삼방
orthorhombic	사방
hexagonal	육방
tetragonal	정방
trigonal	삼방
monoclinic	단사

17
70

(1)



● : Ti^{4+}

○ : O^{2-}

10

(2) body-centered tetragonal

5

(3) distorted hexagonal closed packing (HCP)

5

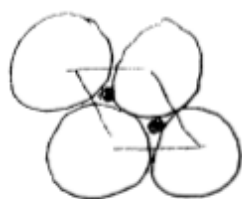
(4) 6

5

(5) 3

5

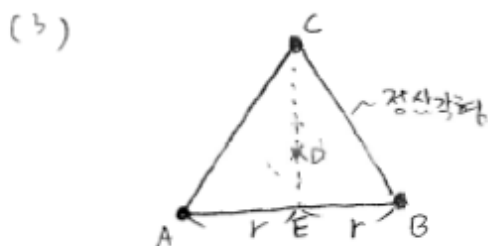
18
40 (1)



(1) + cell 양에
큰 원 (원)의 수 $\frac{1}{6} \times 2 + \frac{1}{3} \times 2 = 1$
작은 원 (원)의 수 2

: A, B 10

(2) 양이온의 배위수 3 10
" " : 6



• 큰 원의 중심 (양이온)
x : 작은 원의 중심 (음이온)

$$(\overline{CE})^2 = (2r)^2 - r^2 = 3r^2$$

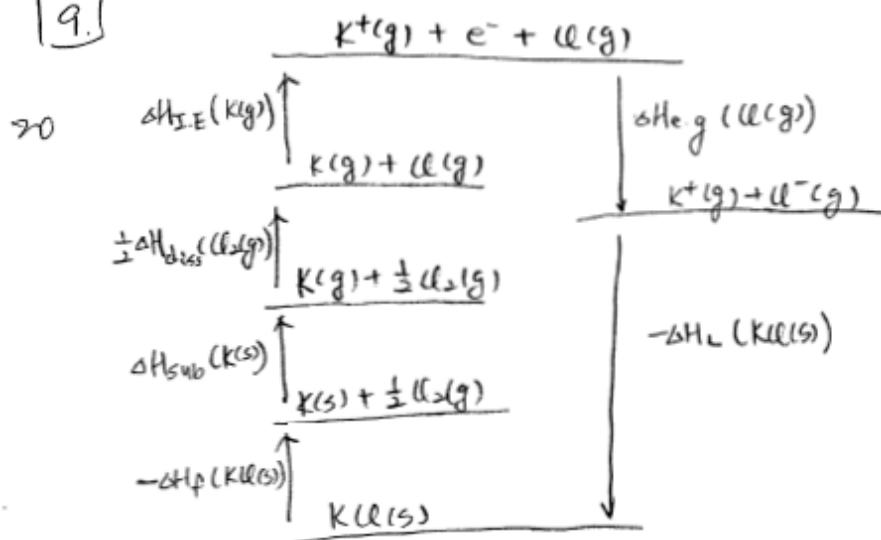
$$\overline{CE} = \sqrt{3}r$$

$$\overline{CD} = r + r = \frac{2}{3} \overline{CE} = \frac{2\sqrt{3}}{3} r = \frac{2}{\sqrt{3}} r$$

↑
음이온의 반경

$$\therefore r_c = \left(\frac{2\sqrt{3}}{3} - 1 \right) r = 0.15r \quad 20$$

9.



$$\therefore -\Delta H_f(KCl(s)) + \Delta H_{sub}(K(s)) + \frac{1}{2} \Delta H_{diss}(Cl_2(g)) + \Delta H_{IE}(K(g))$$

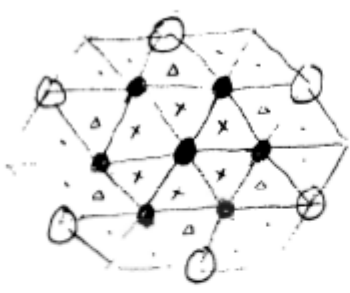
$$+ \Delta H_{eg}(Cl(g)) - \Delta H_L(KCl(s)) = 0$$

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

$$= 719 \text{ KJ/mol}$$

10

70



- : 중심이온
- x : 1st cation sphere
- : 1st anion sphere
- : 2nd cation sphere
- : 3rd cation sphere
- : 2nd anion sphere

○로 표시된 중심이온만을 고려하였을 때

$$V_1 = - \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{6}{2/\sqrt{3} r} \quad \text{1st cation sphere}$$

$$V_2 = + \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{6}{2r} \quad \text{1st anion sphere}$$

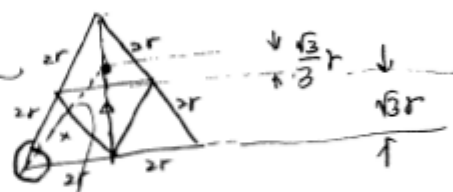
$$V_3 = - \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{6}{4/\sqrt{3} r} \quad \text{2nd cation sphere}$$

$$V_4 = - \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{12}{2\sqrt{3} r} \quad \text{3rd cation sphere}$$

$$V_5 = + \frac{Z_A Z_B e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{6}{2\sqrt{3} r} \quad \text{2nd anion sphere}$$

let $z_A = z_B$, $d = 2r$

$$\therefore V = \frac{Z_A^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 d} (-6\sqrt{3} + 6 - 3\sqrt{3} + 12\sqrt{3}/4 + 2\sqrt{3} \dots)$$



$$l^2 = (2r)^2 + (\sqrt{3} + \frac{\sqrt{3}}{3})^2 r^2$$

$$= 4r^2 + \frac{16}{3} r^2 = \frac{28}{3} r^2$$

$$\therefore l = 2\sqrt{7/3} r$$