

269 만점

1. 다음 빈칸을 채워라 (24점)

원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
1				
	N			
		Rubidium		
39				
	Cs			
		Rutherfordium		

2. XeF_2 분자에서 Xe의 최외각 (Valence Shell)에는 10개의 전자가 존재한다. (45점)

(a) Lewis 구조를 그려라.

(b) VSEPR 이론에 근거한 XeF_2 의 분자구조 그림을 그려라. (결합과 비공유전자쌍 모두 표시) 결합전자쌍 사이의 각도, 결합전자쌍과 비공유전자쌍 사이의 각도, 비공유전자쌍 사이의 각도는?

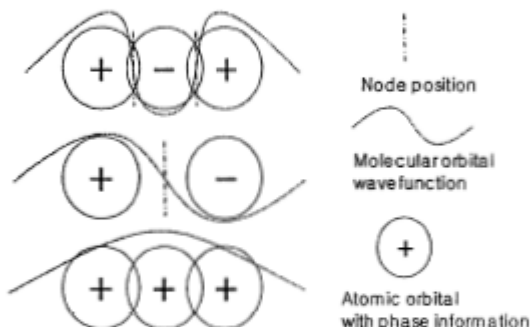
- XeF_2 에서 가장 단순화 시킨 MO (분자궤도함수)는 Xe의 $5p_z$ orbital과 F의 $2p_z$ orbital 사이의 linear combination에 의하여 얻을 수 있다. (z-방향은 Xe-F의 결합 방향)

(c) 다음 힌트를 바탕으로하여 MO의 모양을 그려라. (atomic orbital의 배열과 위상의 정보 포함)

(d) MO들의 에너지 준위와 orbital 이름을 써라. (σ , π , g, u, bonding orbital, non-bonding orbital, anti-bonding orbital 등의 모든 정보)

(e) (d)의 에너지 준위도에 전자를 채우고 Xe-F 결합의 결합 차수를 예측하라.

힌트) H_3^+ 의 MO와 매우 유사



3. 다음 분자 또는 이온의 Lewis 구조식을 그리고 각 원자의 형식전하를 표시하라. 공명구조가 여러개 존재하는 경우에는 가장 가능성이 큰 구조를 동그라미로 표시하라. (형식전하가 0일 경우에는 표시하지 말것) (25점)

(a) CO_2 (3개) (b) NO_2F (4개) (c) F_3BNH_3 (1개)

4. 3의 a,b,c에서 각 원자의 산화수를 표시하라. (15점)

5. BF_3 의 B-F결합은 단일결합의 길이보다 짧다. (60점)

(a) Lewis 구조식으로 결합길이를 설명하여라.

(b) VSEPR로 구조를 예측하여라.

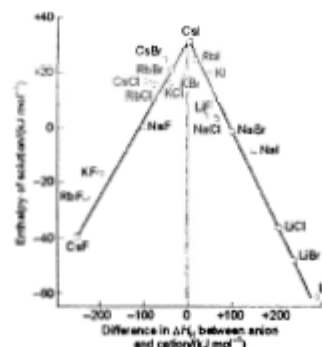
(c) 원자가결합이론과 비편재화된 분자궤도함수 (delocalized molecular orbital)로 구조와 결합길이를 설명하여라.

(d) 분자궤도함수론으로 결합길이를 설명하여라. (B의 $2s$ 와 $2p$ orbital 전부, F의 $2p$ orbital 중 2개를 가지고 생각하여라. F의 $2p$ orbital 중 하나는 1개의 전자를 가지고 있고 다른 하나는 2개의 전자를 가지고 있다. MO에서 σ orbital 6개, π orbital 4개가 생긴다. π orbital 4개 중 하나는 bonding, 둘은 non-bonding, 하나는 antibonding orbital 이다.) 이로부터 B-F의 결합차수는 얼마로 예상할 수 있나?

6. (25점) (a) O_2 의 MO 에너지 준위도를 그려라.

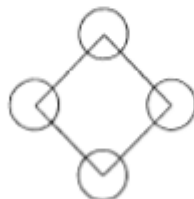
(b) $\text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + e^-$ 변화에서 결합길이는 길어지는가 짧아지는가? 설명하여라.

7. 다음 그림은 이온 결합 물질에서 수화열 (ΔH_{hyd})과 용해열 (ΔH_{sol})과의 상관관계를 나타내는 그래프이다. 이유를 설명하여라. (20점)



8. (50점) 가상의 H_4^{2+} 이온을 생각하여보자. 이 이온이 정사각형의 모양을 한다고 하자.

(a) 수소의 $1s$ orbital로부터 만들어질 수 있는 MO의 모양을 그려라. 아래의 그림에 수소원자 $1s$ orbital의 위상을 표시하라는 문제. (bonding, non-bonding, anti-bonding orbital이 각각 1, 2, 1개 생긴다.) 그림에 node의 위치를 표시하라. (힌트: node의 수가 0, 1, 2 개인 MO들)



(b) (a)의 orbital들의 에너지 준위도를 그리고 H_4^{2+} 이온이 MO만의 개념으로 존재할 수 있을 것인가 없을 것인가 예측하여라.

(c) 실제 상황에서는 어떠한 일이 벌어질 것인가 설명하여라.

1. (24)

원자번호	원소 기호	이름	주	족
1	H	Hydrogen	1	1
7	N	Nitrogen	15	2
37	Rb	Rubidium	1	5
39	Y	Yttrium	3	5
55	Cs	Cesium	1	6
104	Rf	Rutherfordium	4	7

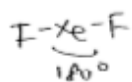
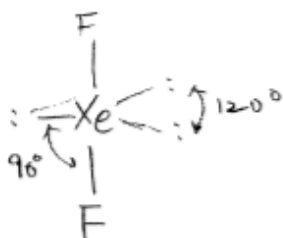
2. XeF₂

(45)

(a)



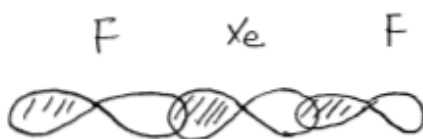
(b)



전자쌍들의 구조 trigonal bipyramid
XeF₂의 구조 linear

10

(c)



ψ_3

10



ψ_2



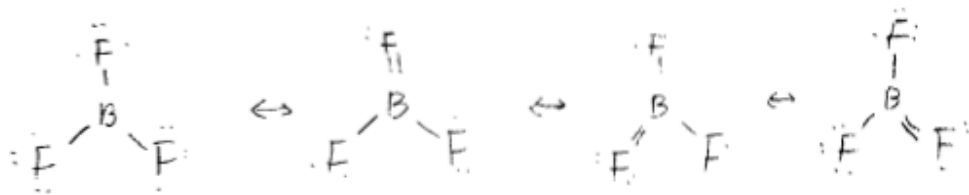
ψ_1

(

5. BF_3

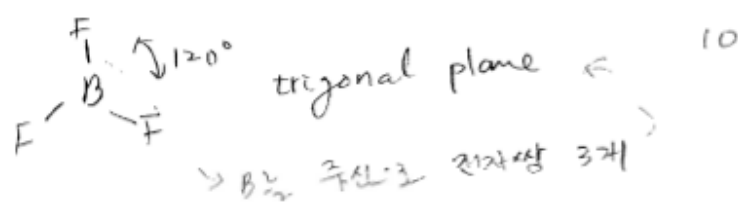
(60)

(a) Lewis의 공배구조 10

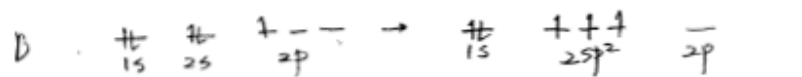


B-F 단일결합과 B=F 이중결합이 존재할 수 있으므로
B-F 결합은 단일 결합과 이중 결합의 중간 값으로
볼 수 있으므로 B-F의 길이는 단일 결합보다 짧다.

(b)

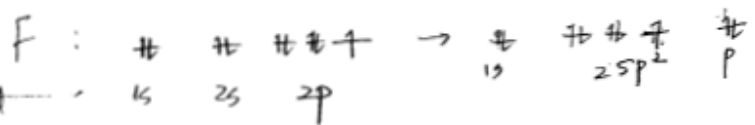


(c)



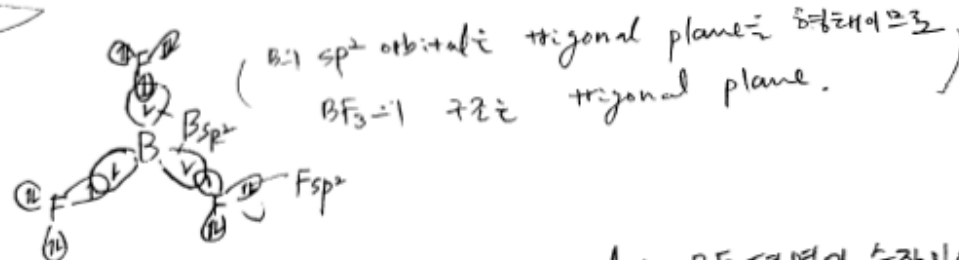
B의 atomic orbital은 혼성하여 sp^2 orbital 3개를 만들고
비어있는 p orbital 하나가 남는다.

F의 atomic orbital은
혼성하여 sp^2 orbital
3개를 만들고 p orbital
하나가 남는다



B의 sp^2 orbital과 F의 sp^2 orbital 중 전자는 1개만

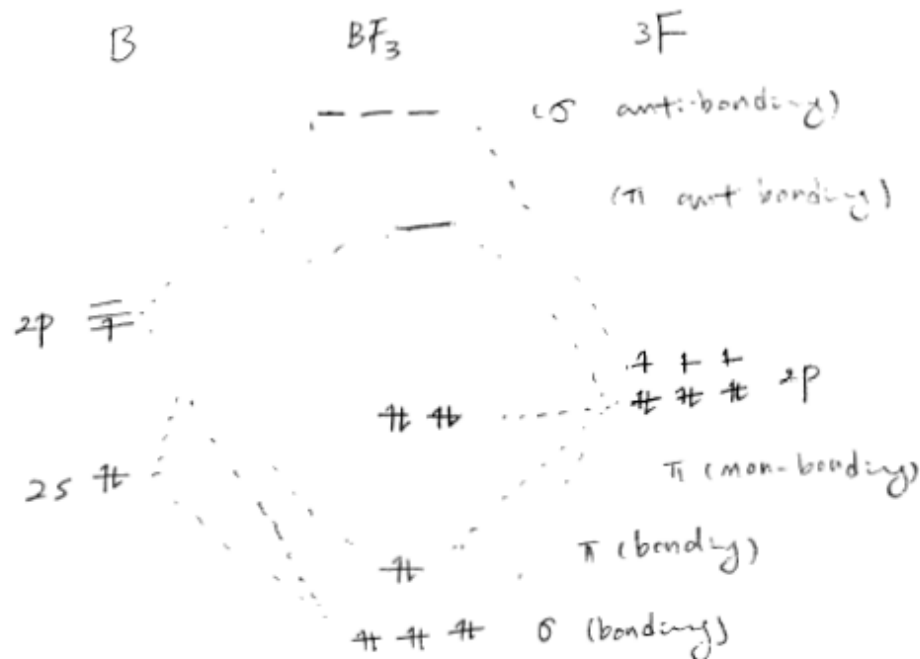
가져온 것은 orbital이 중첩하여 σ -bond 3개를 만든다.
나머지 두 sp^2 orbital
에는 비공유 전자쌍 두쌍이
있다



B의 비어 있는 p orbital과 F의 p orbital은 BF_3 평면에 수직인데
이것이 서로 중첩하여 BF_3 평면에 비평행한 π -orbital을 만들 수
있다. 비가역 전자 6개 존재.
따라서 B-F의 결합회수는 σ -bond와 결합하여
1보다 커지는 거리가 단일 결합보다 짧다.



(d)

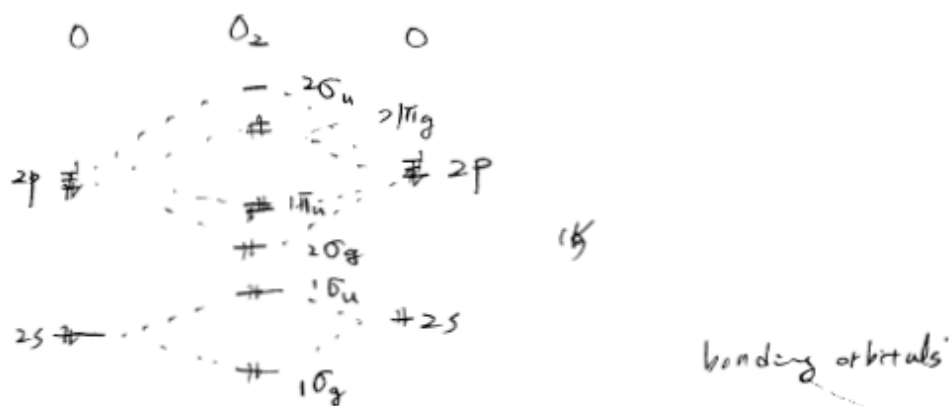


$\therefore$ bond order = 4

of B-F bonds = 3

$\therefore$ B-F bond의 결합차수 = $\frac{4}{3} = 1.33$

6. (a)

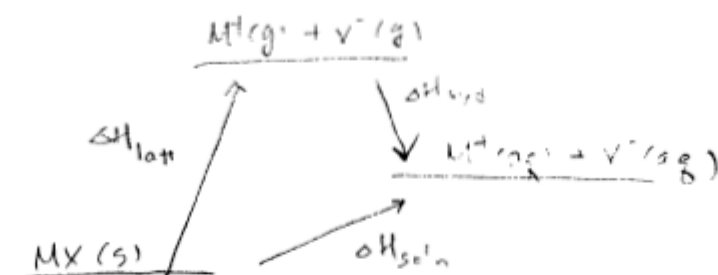


(b) O₂ $\rightarrow$ electron configuration $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g)^2$
 bond order = 2

O₂⁺ $\rightarrow$ electron configuration $(1\sigma_g)^2 (1\sigma_u)^2 (2\sigma_g)^2 (1\pi_u)^4 (1\pi_g)^2$
 $\therefore$ bond order = 2.5

O₂ $\rightarrow$ O₂⁺ + e⁻ m/m O-O 결합 차수 2.5가 된다

7.
20



$$\Delta H_{soln} = \Delta H_{latt} + \Delta H_{hyd}$$

$$(\Delta H_{latt} > 0, \Delta H_{hyd} < 0)$$

lattice enthalpy of hydration enthalpy 즉 electrostatic parameter ($\propto \frac{1}{r}$)의 비례함수

음이온-양이온 거리 또는 이온 반경.

$$\Delta H_{latt} \propto \frac{1}{r_+ + r_-}$$

$$\Delta H_{hyd} \propto \frac{1}{r_+} + \frac{1}{r_-}$$

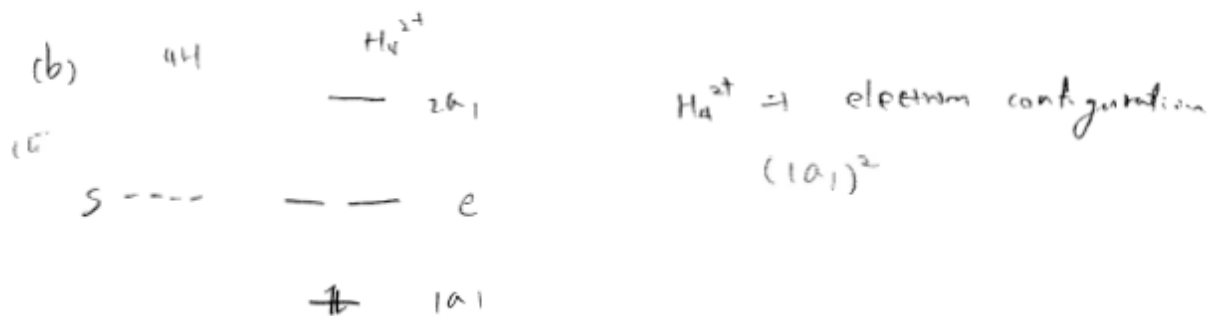
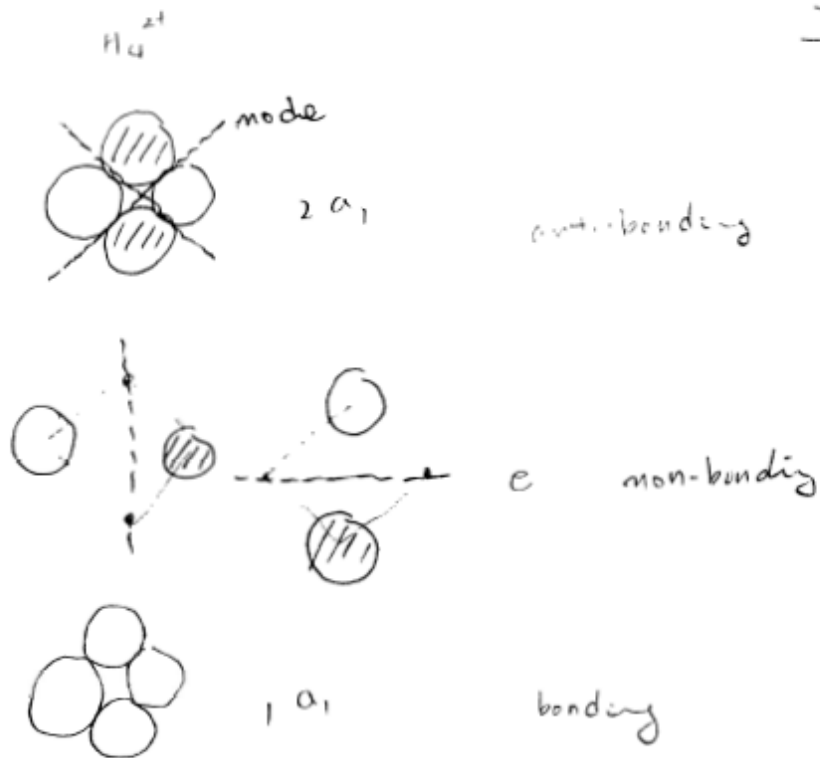
ΔH_{soln} 이 큰 수의 값을 가지려면 ΔH_{latt} 가 작고 ΔH_{hyd} 이 큰 수의 값을 가지면 된다.

.. 두 이온 중 하나는 크고 하나는 작으면 ΔH_{latt} 는 작은 수의 값을 갖고 ΔH_{hyd} 는 큰 수의 값을 가지게 되므로 ΔH_{soln} 은 큰 수의 값을 갖는다

$$\therefore \Delta r \uparrow, \Delta H_{soln} \uparrow \text{ (수치 값은)}$$

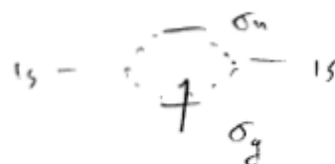
8
50

(a)
20



이름 bonding orbital이 전자가 2개 있으므로
H-H bond는 0.25의 결합 차수를 가지므로
존재가 가능. (H 두개, H^+ 2개 보다 energy level 낮아짐)

- (1) 실제로는 존재하기 어려운 것이다 H_4^{2+} 가 생기면
15 후속의 안정한 H_2^+ 로 분해될 것이기 때문이다



in + gun