

2004년도 무기화학1 중간고사 (2004년 5월 9일)

- 시험시간 10:00AM-1:00 PM
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 여러 가지 상수는 시험지의 끝 부분에 있음.
- 시험에서 주어지지 않은 상수가 있을 경우에는 조교에게 질문하기 바람.

1. 다음표의 빈칸을 채우시오.

원자번호	원소기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
19				
	V			
		Copper		
39				
	Ac			
		Bohrium		

2. 다음의 원자 또는 이온에 대하여 기저상태 전자배치 (ground-state electron configuration)를 써라.  
(a) C, (b) F, (c) Ca, (d) Ga<sup>2+</sup> (e) Bi, (f) Pb<sup>2+</sup>

3. (a) 3d<sub>x-y</sub> 오비탈을 xy-평면에 투영 (projection)한 그림을 그려라. 그림위에 angular node를 표시하고 오비탈의 각 lobe (돌출부)의 위상 (+ 또는 -)을 정확히 표시하라. 이러한 위상들을 결정하는 수학적 관계식을 각 영역에 표시하라.

(b) 3d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub> 오비탈을 xy-평면에 투영 (projection)한 그림을 그려라. 그림위에 angular node를 표시하고 오비탈의 각 lobe (돌출부)의 위상 (+ 또는 -)을 정확히 표시하라. 이러한 위상들을 결정하는 수학적 관계식을 각 영역에 표시하라.

4. (a) Bohr의 원자 모델로부터 수소원자의 n = 1 전자 궤도의 반경을 구하라. (즉, Bohr's radius = a<sub>0</sub>의 값을 구하여라.)

(b) 수소원자에서 전자의 궤도함수를 구하기 위하여 Schrodinger 방정식을 풀면 1s 오비탈은  $\Psi = 2(1/a_0)^{3/2}e^{-r/a_0}$  로 주어진다. Radial distribution function을 사용하여 수소의 핵으로부터 어느 거리에서 1s 오비탈에 있는 전자를 발견할 확률이 가장 큰지 유도하여라. (most probable distance)

5. (a) Slater's rule을 사용하여 C 원자의 2s 오비탈과 2p 오비탈이 느끼는 유효핵전하 (effective nuclear charge) 를 구하라.

(b) 수소꼴 원자의 에너지 준위식과 (a)의 결과를 사용하여 C 원자에서 2s 오비탈과 2p 오비탈 중 어느 오비탈의 에너지 준위가 높은지 설명하여라.

(c) C 원자의 기저상태 전자배치에서 2p 오비탈에 있는 전자들의 (n, l, m<sub>l</sub>, m<sub>s</sub>) 값을 적어라.

6. 전기음성도를 정의하는 방법에는 Mulliken의 전기음성도, Pauling의 전기음성도, Allred-Rochow의 전기음성도 등이 있다. 이들의 차이점에 대하여 기술하여라.

7. RbCl은 온도에 따라 rock-salt 또는 cesium-chloride 구조를 갖는다.

- (a) 각 구조에서 음이온과 양이온의 배위수는 얼마인가?
- (b) 위의 두 구조 중에서 Rb의 반경은 어느 경우에 더 큰가?

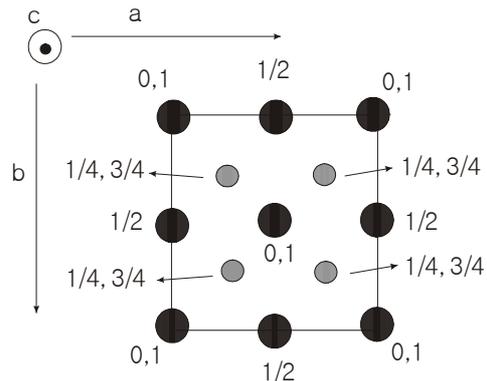
8. MoS<sub>2</sub>의 결정구조에서 S 원자들은 2차원 평면에서보면 조밀쌓음 (closed-packed) 구조를 하고 이러한 구조가 AAAA...의 순서형식으로 3차원적으로 쌓여서 전체적인 구조를 이룬다. 그리고 Mo 원자들은 위의 S로 이루어진 구조에서 배위수가 6 (CN=6) 인 hole에 들어있다. Mo를 둘러싸고 있는 6개의 S 원자들은 어떠한 기하학적 모양을 이루는지 설명하여라.

9. LiBr은 NaCl의 구조를 갖고 밀도는 3.464g/cm<sup>3</sup> 이다. 즉, Br<sup>-</sup> 만 본다면 FCC의 구조를 하고 Li<sup>+</sup>는 octahedral hole을 차지한다. 만일 Br<sup>-</sup>의 FCC 구조에 생기는 octahedral hole에 Li<sup>+</sup>가 정확히 끼어들어 간다고 할 때 각 이온의 이온 반경을 구하라. (Li의 원자량 = 6.94 g/mol, Br의 원자량 = 79.9 g/mol)

10. (a) 8의 구조에서 S 원자의 배위수와 S 원자를 둘러싸고 있는 Mo들이 이루는 기하학적 모양은 무엇인지 밝혀라?

(b) 어떤 가상의 금속이 2차원 평면에서보면 조밀쌓음 (closed-packed) 구조를 하고 이러한 구조가 AAAA...의 순서형식으로 3차원적으로 쌓여서 전체적인 구조를 이룬다고 하자. (즉, 8의 구조에서 Mo 원자가 빠진 구조) 이때 발생하는 hole (CN=6)의 크기는? (즉, 금속 원자의 반경이 r 이라고 할 때 hole의 반경 (r<sub>h</sub>)이 r의 몇배인가를 묻는 문제)

11. 다음 그림은 어떤 이온화합물의 결정구조에서 단위세포를 c축 방향에서 내려다본 그림이다. (a=b=c, α=β=γ=90°) 그림에서 큰 원은 음이온을 나타내고 작은 원은 양이온을 나타낸다. 숫자는 c축에서의 좌표를 나타낸다. (즉, 0,1 은 0과 1의 위치에 구가 있음을 나타내고 1/2은 1/2의 위치에 구가 있음을 나타낸다.)



(a) 음이온 만의 구조는?

- (b) 양이온의 배위수와 배위구조는?
- (c) 음이온의 배위수와 배위구조는?
- (d) 음이온과 양이온의 조성비는?
- (e) 이러한 구조의 이름은?

12. MgO(s)는 rock-salt 구조를 가지는 이온화합물로서 양이온과 음이온간의 거리는 4.21 Å 이다. Born-Haber cycle과 다음의 정보 그리고 여러가지 상수를 이용하여 O(g)의 1차 그리고 2차 전자친화도 (electron affinity)의 합을 구하여라. 풀이 과정에서 Born-Haber cycle을 반드시 그려라.

MgO(s)의 formation enthalpy = -602kJ/mol  
 Mg(s)의 sublimation enthalpy = 148 kJ/mol  
 O<sub>2</sub>(g)의 dissociation enthalpy = 497 kJ/mol  
 Mg(g)의 1st ionization energy 와 2nd ionization energy의 합 = 2187 kJ/mol  
 Rock-salt 구조의 Madelung constant = 1.748  
 Born-Mayer 방정식에서 d\* = 0.345 Å

13. (보너스) 본 무기화학1 강의에 있어서 학생이 생각하는 모든 긍정적, 부정적인 견해를 써라.

● 여러 가지 상수

Planck constant :  $h = 6.626 \times 10^{-34}$  Js  
 Speed of light :  $c = 2.997 \times 10^8$  m/s  
 Electron charge :  $e = -1.602 \times 10^{-19}$  C  
 Vacuum permittivity :  $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$  C<sup>2</sup>/Jm  
 Mass of electron :  $m_e = 9.109 \times 10^{-31}$  kg  
 Avogadro's number :  $N_A = 6.022 \times 10^{23}$  /mol  
 Gas constant :  $R = 8.314$  J/K·mol  
 Rydberg constant :  $R_H = 1.097 \times 10^5$  cm<sup>-1</sup>