

2004년도 무기화학1 기말고사 (2004년 6월 15일)

- 시험시간 9:00-12:00
- 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)
31				
	Pd			
		Silver		
62				
	Ho			
		Einsteinium		

2. (a) 금속 전도체 (metallic conductor) 와 반도체 (semiconductor) 를 구별하는 band 그림을 그려라. (b) 금속 전도체와 반도체의 전도도 (conductivity)의 온도에 따른 변화를 그래프로 그리고 그 이유를 설명하여라. (c) 절연체 (insulator)와 반도체의 전도도가 온도에 따라 변화하는 모양을 보고 어떻게 구별할 수 있는지 설명하여라.

3. SF₆에 대하여 다음을 답하라.

- (a) 각 원소의 형식전하 (formal charge) 는?
- (b) 각 원소의 산화수 (oxidation number) 는?
- (c) Lewis 구조를 그려라. 이러한 종류의 분자에 대한 특별한 명칭은?
- (d) VSEPR로 설명하는 구조는?
- (e) Valence Bond Theory에 의한 결합과 구조에 대하여 설명하여라?
- (f) Molecular Orbital Theory를 사용하여 MO의 에너지 준위도를 그리고 설명하여라.

4. Optical spectroscopy 실험에 의하면 Si의 band gap은 1.12 eV 로 알려져 있다. Si의 100°C 와 0°C 에서의 전도도의 비를 구하라.

5. 두 개의 sp 혼성오비탈은 다음과 같이 s 오비탈과 p 오비탈의 linear combination으로 만들어진다.

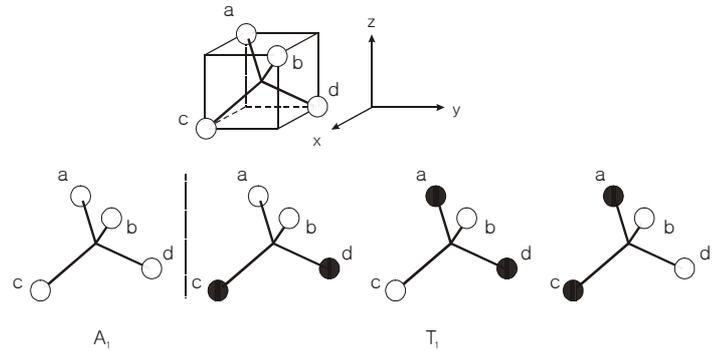
$$\phi_{sp^+} = 1/\sqrt{2} (\phi_s + \phi_{pz})$$

$$\phi_{sp^-} = 1/\sqrt{2} (\phi_s - \phi_{pz})$$

ϕ_{sp^+} 혼성오비탈과 ϕ_{sp^-} 혼성오비탈의 그림을 s 오비탈과 p_z 오비탈의 그림과 위상으로부터 유도하는 과정을 그림으로 그리고 두 오비탈이 서로 180° 임을 증명하여라.

6. CH₄의 MO는 C의 2s와 2p 오비탈 그리고 H의 1s 오비탈로부터 만들어진다. 다음의 Symmetry-Adapted Orbital들을 보고 물음에 답하라. (그림에서 구 (球) 들은 정사면체의 구조를 이루는데 가상의 정육면체 안에서의 위치가 표시되어 있다. x, y, z 축과 a, b, c, d의 기호는

이 문제 안에서는 절대적이다. 하얀 구는 + 위상을 검은 구는 - 위상을 의미한다. H의 1s 오비탈의 wavefunction 은 H1s_a, H1s_b...로 표시하고 C의 2S 오비탈은 C2s, C의 2p 오비탈은 C2p_x ... 로 표시하라.)

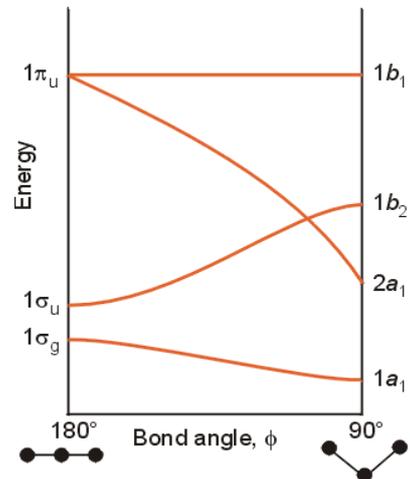


- (a) H의 1s 오비탈 4개로부터 만들어지는 Symmetry-Adapted Orbital 4개의 wavefunction을 써라. (이것들은 MO를 건설하는 과정에서 H의 1s 오비탈 4개로부터 만들어지는 새로운 atomic orbital 이라고 생각하면 된다. 만들어지는 오비탈의 명칭은 ϕ_{a1} 과 ϕ_{t1} 이다. ϕ_{t1} 에는 세 개의 오비탈이 있는데 각각을 $\phi_{t1}^1, \phi_{t1}^2, \phi_{t1}^3$ 라고 하여라)
- (b) ϕ_{a1} 과 만나서 MO를 만들 수 있는 C의 오비탈은?
- (c) $\phi_{t1}^1, \phi_{t1}^2, \phi_{t1}^3$ 와 만나서 MO를 만들 수 있는 C의 오비탈은? (각각의 $\phi_{t1}^1, \phi_{t1}^2, \phi_{t1}^3$ 에 대하여)
- (d) 만들어지는 CH₄의 MO들의 에너지 준위도를 그려라. 그리고 각 MO와 C의 2s와 2p 그리고 H의 ϕ_{a1} 과 ϕ_{t1} 오비탈과의 상관 관계를 선으로 연결하여라. MO의 이름을 정확히 써라.
- (e) 위 (d)의 각 MO에서 node의 수는?

7. (a) NO₂F의 가능한 Lewis 구조들을 (resonance structures) 그려라. 각 구조에서 원소들의 형식전하를 표시하라.

(b) (a)의 구조 중에서 가장 안정된 형태로 예상되는 것은?

8. 다음의 XH₂ (X=B,Be,C,N,O) 분자에 대한 Walsh diagram을 보고 답하라. 1σ_g 1σ_u, 1a₁, 1b₂ 오비탈은 bonding orbital 이다.



(a) 1σ_g와 1σ_u 오비탈은 X의 어떤 오비탈과 H의 어떤 오

비탈로부터 만들어지는지 그림으로 표시하여라. 각 atomic orbital의 위상을 정확히 표시하라.

(b) $1a_1$ 와 $1b_2$ 오비탈은 X의 어떤 오비탈과 H의 어떤 오비탈로부터 만들어지는지 그림으로 표시하여라. 각 atomic orbital의 위상을 정확히 표시하라.

(c) $1\sigma_g$ 와 $1\sigma_u$ 오비탈에 대응하는 anti-bonding orbital 은 X의 어떤 오비탈과 H의 어떤 오비탈로부터 만들어지는지 그림으로 표시하여라. 각 atomic orbital의 위상을 정확히 표시하라. 각각의 anti-bonding orbital 의 이름도 위의 그림에 나와 있는 MO의 이름을 바탕으로 정확히 써라.

(d) BH_2 는 H-B-H의 각도가 131° 로 측정이 된다. BH_2 의 전자배치를 써라.

(e) BH_2 의 first excited state의 전자배치를 써라. 그 때의 구조는?

9. Pauling의 전기음성도에 대하여 기술하여라.

● 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 : $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ C²/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⁻¹

Boltzman constant: $k = 8.614 \times 10^{-5}$ eV/K