

2-110 12점

- 시험시간 10:00AM-1:00 PM
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 휴대전화의 전원은 무조건 끌 것. 감독관의 눈에 전화기가 보이면 이유여하를 막론하고 부정행위로 간주 함.
- 여러 가지 상수는 시험지의 끝 부분에 있음.

1. 다음표의 빈칸을 채우시오. (표를 반드시 그릴 것) (24)

원자번호	원소 기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
14				
	Cl			
		Technetium		
70				
	Po			
		Dubnium		

2. 다음의 빈칸을 채워라. (28)

(a) In modern periodic table, The [일곱단어] (IUPAC) has recommended that the groups be numbered 1 through 18.

(b) [세단어], which states that there is a relationship between the inherent uncertainties in the [한단어] and [한단어] of an electron moving in the x direction:

$$\Delta x \Delta p_x \geq h/4\pi.$$

(c) The [한단어] quantum number n is primarily responsible for determining the overall energy of an atomic orbital. The [두단어] quantum number l determines the angular momentum of the orbital or shape of the orbital and has a smaller effect on the energy.

(d) The 2s orbital has one [두단어], a surface with zero electron density.

(e) When the orbitals are [한단어] (have the same energy), both Coulombic and [한단어] energies favor the unpaired configuration over the paired configuration.

(f) [두단어] can be defined as the energy required to remove an electron from a negative ion, whereas the [두단어] is the energy required to remove an electron from a gaseous atom or positive ion.

(g) The species CO_3^{2-} , NO_3^- , and SO_3 , are [한단어] (have the same electronic structure). Their Lewis structures are identical, except for the identity of the central atom.

(h) Experimentally, the polarity of the molecules is measured indirectly by measuring the [두단어], which is the ratio of the capacitance of a cell filled with the substance to be measured to the capacitance of the same cell with a vacuum between the electrodes.

(i) In the reflection operation, the molecule contains a [한단어] plane.

(j) A [세단어] is included in all groups, with characters of 1 for all operations

3-110 12점

3. 3차원 공간에 길이 L 인 입자가 길이 L 인 입자원 공간에 있을 때를 가정하여 다음에 답하라.

(a) 입자의 상태를 나타내는 파동함수와 그 에너지 준위를 유도하라. (particle in a box)

(b) 위의 입자가 양자수 $n = 1, 2, 3, 4$ 인 상태에 있을 때 입자를 발견할 확률을 나타내는 식을 유도하라.

(c) (b)를 그림으로 나타내어라.

(d) 위 입자의 질량이 전자의 질량과 같고 $L=2\text{\AA}$ 일 때 양자수 $n = 1, 2, 3$ 에 대하여 에너지 준위를 계산하라.

(e) 위 입자의 질량이 학생의 몸무게 (60 kg)와 같고 $L=20\text{m}$ 일 때 양자수 $n = 1, 2, 3$ 에 대하여 에너지 준위를 계산하라.

(f) (d)와 (e)의 결과로부터 학생이 생각할 수 있는 것을 모두 써라.

4. 수소원자에 대하여 Schrodinger 방정식을 풀었다. 다음에 답하라. (16)

(a) Radial function 이, $R(r) = \frac{1}{81\sqrt{3}} \left[\frac{2Z}{a_0} \right]^{3/2} (6 - \sigma) \sigma e^{-\sigma/3}$

로 주어지고 angular function 이 $Y = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{z}{r}$

로 주어지는 파동함수는 어느 오비탈을 나타내는가? 여기서 $\sigma = Zr/a_0$ ($Z=1$) 이고 a_0 는 어떤상수(Bohr radius) 이다.

(b) (a) 오비탈의 그림을 그려라. (node와 위상, 축을 정확히 표시)

(c) Radial function을 r -축에 대하여 그려라.

(d) Radial probability (distribution) function을 r -축에 대하여 그려라.

5-110 12점

5. 산소원자에 대하여 다음에 답하라.

(a) 기저상태 전자배치 (ground-state electron configuration)를 써라.

(b) 2s 오비탈에 있는 전자들의 (n, l, m_l, m_s) 값을 써라.

(c) 2p 오비탈에 있는 전자들을 배치하는 두 가지 가능한 방법은?

(d) (c)의 두 가지 배치에 대하여 어느 배치가 더 에너지 상태가 낮은가를 알아보기로 하자. 위의 두 가지 배치에 대하여 각각 Coulombic energy 와 exchange energy의 개수를 구하라.

(e) (c)의 두 가지 배치 중 어느 배치의 에너지 상태가 낮은가? (왜? 도 설명)

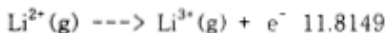
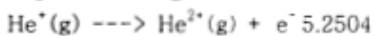
(f) 기저상태 산소의 스핀양자수 (S) 는?

(g) Slater's rule를 사용하여 산소 원자의 2s 오비탈과 2p 오비탈이 느끼는 유효핵전하 (effective nuclear charge) 를 구하라.

26

6. 다음의 이온화 에너지 경향으로부터 기저 상태에 ($1s^1$) 있는 수소 원자를 $3s^1$ 의 여기상태로 만들기 위하여 필요한 빛의 파장을 구하여라.

I.E (MJmol^{-1})



● 여러 가지 상수

Planck constant : $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$

Speed of light : $c = 2.997 \times 10^8 \text{ m/s}$

Electron charge : $e = -1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$

Vacuum permittivity : $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}$

Mass of electron : $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$

Avogadro's number : $N_A = 6.022 \times 10^{23} / \text{mol}$

Gas constant : $R = 8.314 \text{ J/Kmol}$

Rydberg constant : $R_H = 1.097 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$

7. K와 Br 중 이온화 에너지가 큰 것은? 그 이유는?

8. 다음 분자 또는 이온의 Lewis 점구조식을 그려라. (공명 구조가 있으면 모두 그려라.)

(a) VOCl_3 , (b) PCl_3 , (c) SOF_4 , (d) ClO_2^- , (f) ClO_3^-

9. 8의 분자또는 이온에 대하여 VSEPR에 따른 구조를 그려라.

10. 8의 분자또는 이온이 어느 점군에 속하는지 써라.

11. 다음의 표를 보고 답하라.

분자	결합각 ($^\circ$)	결합 길이 (pm)	분자	결합각 ($^\circ$)	결합 길이 (pm)	분자	결합각 ($^\circ$)	결합 길이 (pm)
H_2O	104.5	97	OF_2	103.3		OCl_2	110.9	
H_2S	92	135	SF_2	98	159	SCl_2	103	204
H_2Se	91	146						
H_2Te	90	169						
NH_3	106.6	101.3	NF_3	102.2	137	NCl_3	106.8	175
PH_3	93.8	142	PF_3	97.8	157	PCl_3	100.3	204
AsH_3	91.83	151.9	AsF_3	96.2	170.6	AsCl_3	97.7	217
SbH_3	91.3	170.7	SbF_3	87.3	192	SbCl_3	97.2	233
						PBr_3	101	220
						AsBr_3	97.7	236
						SbBr_3	95	249

출처: N. N. Greenwood and A. Earnshaw, *Chemistry of the Elements*, 2nd ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, 1997, pp. 557, 767; A. F. Wells, *Structural Inorganic Chemistry*, 5th ed., Oxford University Press, Oxford, 1987, pp. 705, 793, 846, and 879.

(a) NH_3 , PH_3 , AsH_3 , SbH_3 의 결합각의 경향을 보이는 이유를 써라.

(b) PF_3 , PCl_3 , PBr_3 의 결합각의 경향을 보이는 이유를 써라.

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

13. 다음의 점군은 ?

(a) CH_4 (b) p-dichlorobenzene (c) cyclohexane (chair) (d) wine glass (e) H_2O

14. (a) $13(e)$ 의 점군에 속하는 모든 symmetry operation 들을 찾아라.

(b) $y=x$ 함수에 대하여 (a)의 모든 symmetry operation 들에 대한 character 값들은? (irreducible representation 을 찾으라는 뜻) (문제 성립 안됨)

(c) $y=x$ 함수는 이 점군에서 어느 symmetry type에 속하는 가? (문제 성립 안됨)

1.

(24)

원자번호	화학기호	이름	주기	족
(14)	Si	Silicon	14 (4A)	3
17	(Cl)	Chloride	17 (7A)	3
43	Tc	(Technetium)	7 (7B)	5
(70)	Yb	Ytterbium	Lanthanide	6
84	(Po)	Polonium	16 (6A)	6
105	Pb	(Dubium)	5 (5B)	7

2

(a) International Union of Pure and Applied Chemistry 5

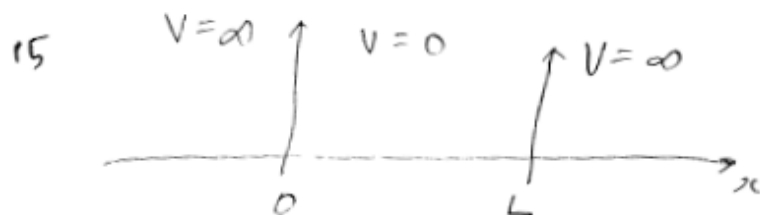
(28) (b) Heisenberg's uncertainty principle

- Location, momentum (position) 5
- (c) principal, angular momentum 3
- (d) nodal surface 2
- (e) degenerate, pairing (exchange) 2
- (f) Electron affinity, ionization energy 4
- (g) isoelectronic 1
- (h) dielectric constant 2
- (i) mirror 1
- (j) totally symmetric representation 3

3. (40)

(2)

(a)



$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi$$

at $x \leq 0$ and $x \geq L$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \infty \psi = E\psi$$

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad \text{--- (1)}$$

at $0 \leq x \leq L$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi \quad \text{--- (2)}$$

a trivial solution

$$\psi = A \sin rx + B \cos rx \quad \text{--- (3)}$$

at $x=0$

$$\psi(0) = A + B = 0 \quad \therefore B = -A$$

$$\therefore \psi = A \sin rx \quad \text{--- (4)}$$

$$+\frac{h^2}{8\pi^2m} Ar^2 \sin rx = E A \sin rx$$

$$E = \frac{r^2 h^2}{8\pi^2m} \quad \therefore r = \frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} \quad \text{--- (5)}$$

at $x=L$

$$\psi(L) = A \sin\left(\frac{2\pi}{h} \sqrt{2mE} L\right) = 0$$

$$\therefore \frac{2\pi L}{h} \sqrt{2mE} = \pm n\pi = rL \quad \text{--- (6)} \quad \therefore r = \frac{n\pi}{L}$$

($n = 0, 1, 2, \dots$)

$$\therefore \psi = A \sin \frac{n\pi x}{L} \quad \text{--- (7)} \quad n \neq 0 \quad (\because \text{when } n=0, \psi=0 \text{ at all times})$$

normalization

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_0^L (A \sin \frac{n\pi}{L} x)^2 dx \\
 &= A^2 \int_0^L (\sin \frac{n\pi}{L} x)^2 dx = A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos \frac{2n\pi}{L} x}{2} dx \\
 &= \frac{A^2}{2} \left[x - \frac{L}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi}{L} x \right]_0^L \\
 &= \frac{A^2}{2} L
 \end{aligned}$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\therefore \psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad n=1, 2, 3, \dots$$

$$\textcircled{1} \rightarrow \frac{2\pi L}{h} \sqrt{2mE} = n\pi$$

$$\therefore E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad n=1, 2, 3, \dots$$

(b)

$$|\psi|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right)$$

$$|\psi_1|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L}$$

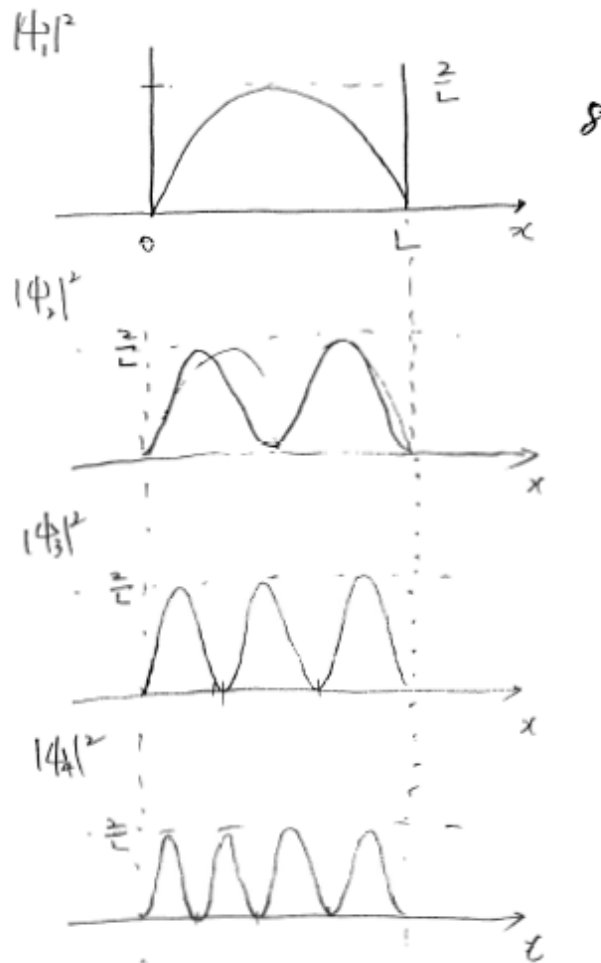
$$|\psi_2|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{2\pi x}{L}$$

$$|\psi_3|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{3\pi x}{L}$$

$$|\psi_4|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{4\pi x}{L}$$

4

(c)



(d)

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

$$= \frac{n^2 (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{8 \times 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2 \times 10^{-10} \text{ m})^2}$$

$$= n^2 \times 1.506 \times 10^{-18} \text{ J}$$

3

$$\therefore E_1 = 1.506 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (n=1)$$

$$E_2 = 6.024 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (n=2)$$

$$E_3 = 1.355 \times 10^{-17} \text{ J} \quad (n=3)$$

$$E_4 = 2.410 \times 10^{-17} \text{ J} \quad (n=4)$$

(e) $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$

$= n^2 (6.626 \times 10^{-34} \text{ Js})^2 / (9 \times 10 \text{ kg} \times (20 \text{ m})^2)$

$= n^2 \times 2.247 \times 10^{-72} \text{ J}$

3

$E_1 = 2.247 \times 10^{-72} \text{ J}$

$E_2 = 9.147 \times 10^{-72} \text{ J}$

$E_3 = 2.058 \times 10^{-71} \text{ J}$

$E_4 = 3.659 \times 10^{-71} \text{ J}$

f) 재료가 크거나 공간의 크기가 클수록 양자화의 효과가 줄어들다

5

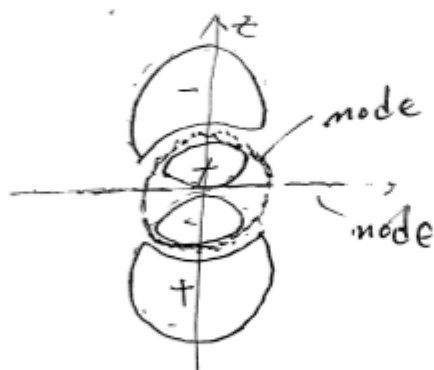
4

(a)

$3p_{1/2}$

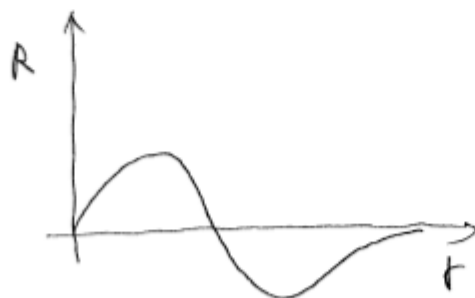
4

(b)



4

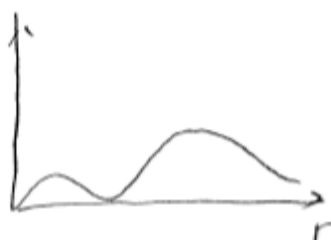
(c)



4

(d)

$4\pi r^2 R^2$



4

5

(a) $1s^2 2s^2 2p^4$ 3

(b) $2s^2 \rightarrow \uparrow\downarrow$ $(2 \ 0 \ 0 \ \frac{1}{2})$ st $(2 \ 0 \ 0 \ -\frac{1}{2})$ 4

(c) ① $\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$ st ② $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$ — 4

(d) ① Coulombic : $\uparrow\downarrow \uparrow \uparrow$ 12H
Exchange $\uparrow \uparrow \uparrow$ 3>4 $\underline{1-2}, \underline{2-3}, \underline{3-4}$

$\therefore$ Pairing energy $\pi_c + 3\pi_e$ 4

② Coulombic : $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$ — 2>4

Exchange $\uparrow \uparrow$ — 2 2>4
 $\uparrow\downarrow \uparrow\downarrow$ 3-4 4

$\therefore$ Pairing energy $2\pi_c + 2\pi_e$

(e) $\pi_c > 0, \pi_e < 0$

(f) $\therefore$ ① $\neq$ 에너지 상하가 더 낮다 4

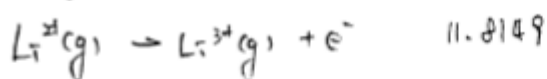
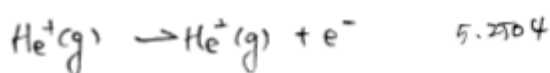
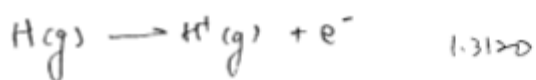
(f) $S = 1$ 3

(g) $Z_{eff} = 8 - 5$ $(1s^2)(2s^2 2p^6)$

$= 8 - 0.35 \times 5 - 0.85 \times 2$

$= 4.55$

4

Ionization Energy (MJ mol⁻¹)

$$\therefore \text{H-1 s orbital의 energy 준위} : 1.3120 \text{ MJ/mol} \Rightarrow -\frac{1.3120 \times 10^6 \text{ J}}{6.022 \times 10^{23}} \\ = -2.179 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\text{He}^+ \quad " \quad : \frac{5.2504 \times 10^6 \text{ J}}{6.022 \times 10^{23}} = -8.719 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\text{Li}^{2+} \quad " \quad : \frac{11.8149 \times 10^6 \text{ J}}{6.022 \times 10^{23}} = -1.962 \times 10^{-17} \text{ J}$$

• 수소꼴 원자의 energy 준위

$$E = -\frac{Z^2 R}{n^2} \quad (n \text{ 주양자수, } Z: \text{원자번호})$$

$$\therefore R = -\frac{n^2}{Z^2} E_{H_k} = -\frac{1^2}{1^2} (-2.179 \times 10^{-18} \text{ J}) = 2.179 \times 10^{-18} \text{ J} \\ = -\frac{1^2}{2^2} E_{\text{He}^+} = -\frac{1}{4} (-8.719 \times 10^{-18} \text{ J}) = 2.180 \times 10^{-18} \text{ J} \\ = -\frac{1^2}{3^2} E_{\text{Li}^{2+}} = -\frac{1}{9} (-1.962 \times 10^{-17} \text{ J}) = 2.180 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\therefore R (\text{평균}) = \underline{2.180 \times 10^{-18} \text{ J}}$$

$$\bullet \Delta E_{31} = E_{\text{H}_{35}} - E_{\text{H}_{15}} = -\frac{1}{9} R - (-R) = \frac{8}{9} R$$

$$= \frac{8}{9} \times 2.180 \times 10^{-18} \text{ J} = 1.938 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$\Delta E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$$

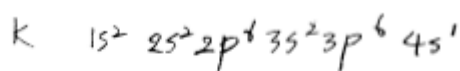
$$\therefore \lambda = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \cdot 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}}{1.938 \times 10^{-18} \text{ J}}$$

$$= 1.025 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$= \underline{\underline{1025 \text{ \AA}}}$$

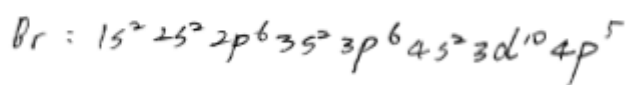
2-15

8)



effective nuclear charge for 4s electron, Z_{eff} ,

$$\begin{aligned} Z_{eff} &= Z - \sigma \\ &= 19 - [0.85 \times 8 + 1.00 \times 10] \\ &= 19 - 16.8 \\ &= 2.2 \end{aligned}$$



effective nuclear charge for 4p electron, Z_{eff} ,

$$\begin{aligned} Z_{eff} &= Z - \sigma \\ &= 35 - [0.35 \times 6 + 0.85 \times 18 + 1.00 \times 10] \\ &= 35 - 27.4 \\ &= 7.6 \end{aligned}$$

$$\therefore Z_{eff}(K) < Z_{eff}(Br) \text{ and } r(K) > r(Br)$$

이온화 에너지는 Z_{eff}/r^2 에 비례하므로

$$\underline{I.E.(Br) > I.E.(K)}$$

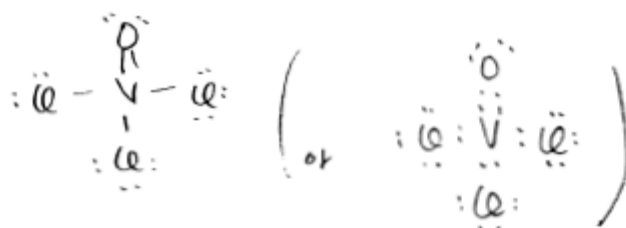
참고

$$\begin{aligned} I.E.(K) &= 4.34 \text{ eV} \\ I.E.(Br) &= 11.814 \text{ eV} \end{aligned}$$

8
15

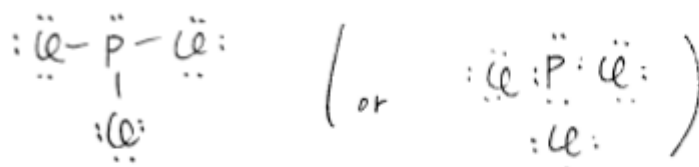
(a) VOCl_3

3



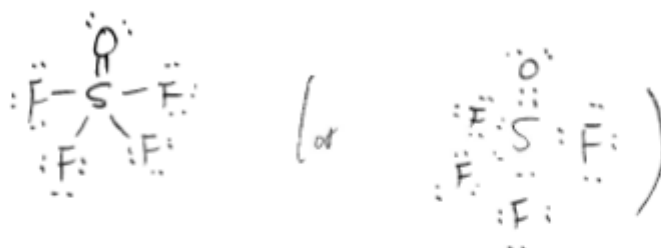
(b) POCl_3

3



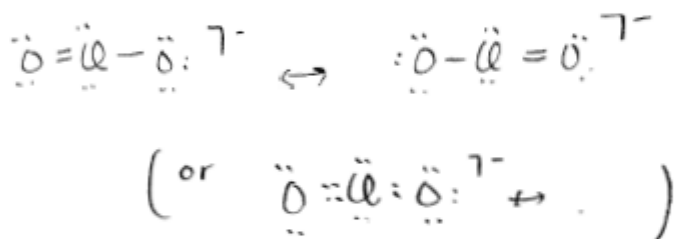
(c) SOF_4

3



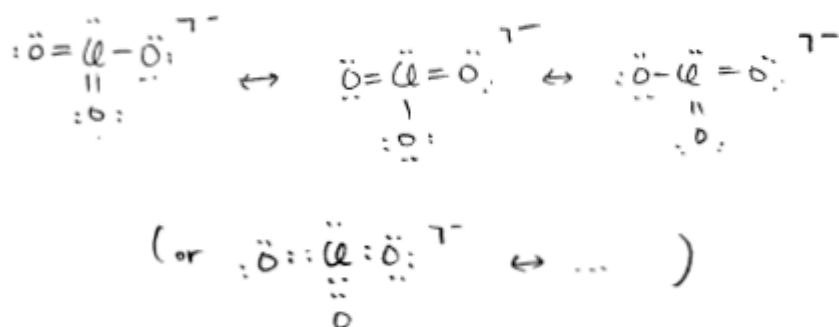
(d) ClO_2^-

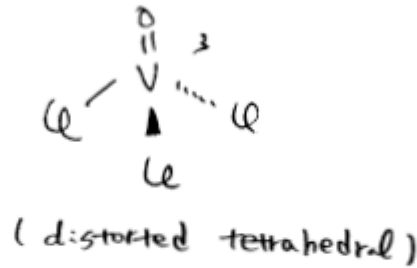
3



(e) ClO_3^-

3

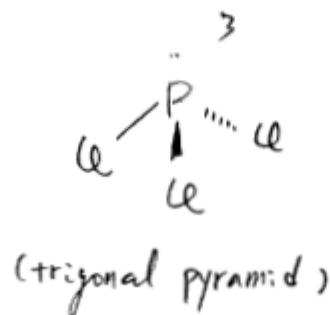


(a) VOCl_3 

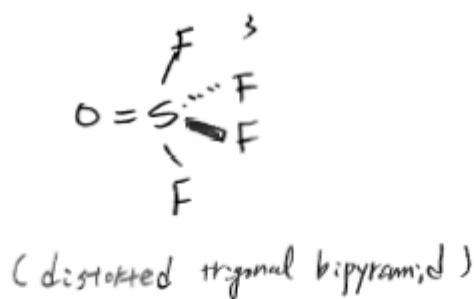
9 15
VSEPR

10 15
point group

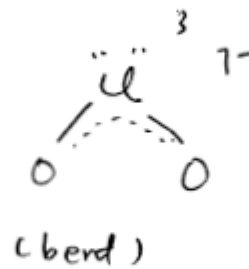
3
 C_{3v}

(b) PCl_3 

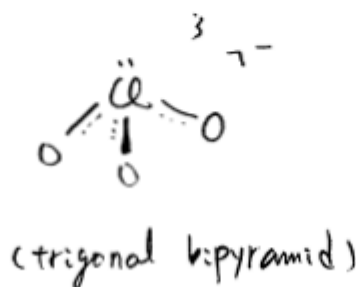
3
 C_{3v}

(c) SF_4 

3
 C_{2v}

(d) ClO_2^- 

3
 C_{2v}

(e) ClO_3^- 

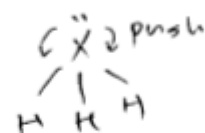
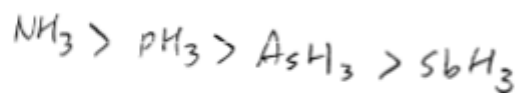
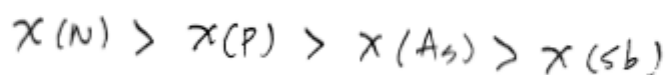
3
 C_{3v}

11 14

(a)

H-X-H 재향각

7

전기음성도, χ 

이므로 재향전자쌍의 전자 밀도가 N이 제일 가장

N쪽으로 치우쳐져서 재향전자쌍의 반반향이 크게 된다. 또한

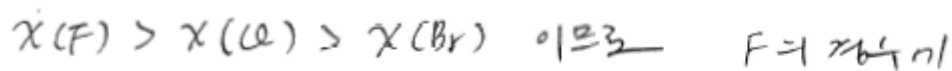
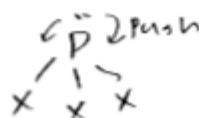
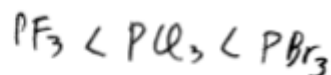
atomic size이 커서

$\text{N} < \text{P} < \text{As} < \text{Sb}$ 이므로 Sb의 제일 재향전자쌍의 반반향이 가장 작다. 따라서 위의 재향각의 차이를 보인다.

(b)

X-P-X 의 재향각

7



재향전자쌍의 전자 밀도가 F쪽으로 치우쳐져서

반반향이 줄어들어서 PF_3 의 재향각이 가장 작다.

12
15

전기음성도 (Electronegativity) : Power of an atom to attract electrons to itself when it is part of a compound

Milliken의 전기음성도 : Milliken 이온화 에너지 (I) 와 전자첨착도 (Ea) 가
측수인 전자를 잡아당기는 힘이 커지는 것을 반영하여
전기음성도 (χ_M)을 I와 Ea의 평균으로 정의

$$\chi_M = \frac{1}{2}(I + E_a)$$

Pauling의 전기음성도 : Pauling은 서로 다른 원자로 이루어진 분자에서

bond enthalpy (bond energy) 는 거의 대부분의 homonuclear
분자의 bond enthalpy 보다 큼을 관찰. Pauling은 AB 분자의
bond enthalpy 와 AA분자와 BB분자의 bond enthalpy 의
평균과의 차이를 ionic resonance energy 라고 하였다

$$(\text{ionic resonance energy}) = B(A-B) - \frac{1}{2}(B(A-A) + B(B-B))$$

ionic resonance energy 는 전기음성도의 차이로 부터 발생
한다고 하였다. 그리고 전기음성도의 차이를 다음과 같이 정의
하였다

$$|\chi_p(A) - \chi_p(B)| = 0.102 (\Delta / \text{kJ mol}^{-1})^{1/2}$$

$$\Delta = B(A-B) - \frac{1}{2}\{B(A-A) + B(B-B)\}$$

Pauling의 전기음성도는 Milliken의 전기음성도와

$$\chi_p = 1.35 \chi_M^{1/2} - 1.37 \text{ 의 관계가 있다}$$

Allred-Rochow 전기음성도 : Allred와 Rochow 는 원자의 표면기체 전자가
느끼는 electric field의 세기에 관련된 전기음성도가 존재한다고 생각하였다.

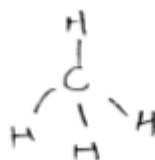
그러나 Pauling의 전기음성도와 비교하여 전기음성도는 다음과 같이 주어졌다고
하였다

$$\chi_{AR} = 0.744 + \frac{0.359 Z_{eff}}{(r/A)^2} \quad \text{여기서 } Z_{eff} \text{ 는 effective nuclear charge, } r \text{ 은 covalent radius.}$$

13

15

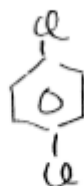
(a)



T_d

(b)

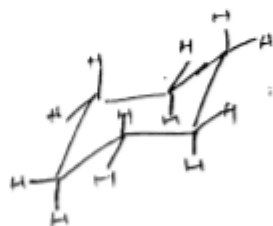
p-dichlorobenzene



D_{2h}

(c)

cyclohexane



D_{3d}

(d)

wine glass



$C_{\infty v}$

(e)

H2O



C_{2v}

14

18

(a)

$E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'$

(b)

몇 개 몇 개 알지 5

(c)

"

5