

(b) 위 표를 이용하여 $MgCl_2$ 의 격자에너지(Lattice energy)를 구하여라. (Born-Harber cycle도 그럴 것)

이름 _____

- 시험시간 10:00 - 13:00
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 휴대전화의 전원은 무조건 끌 것. 감독관의 눈에 전화기가 보이면 이유 여하를 막론하고 부정행위로 간주 함.
- 풀이에 필요한 여러 가지 상수 및 데이터는 마지막 쪽에 있음.
- 답은 주어진 네모 안에 적을 것. 빈 공간에는 풀이 과정을 적을 것.
- 문제수: 12, 시험지: 6쪽

1. 다음표의 빈칸을 채우시오.

원자번호	원소 기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
12				
	Cr			
		Palladium		
76				
	Th			
		Rutherfordium		

2. (a) 다음의 빈칸을 채워라.

원소 또는 화합물	열역학 성질	열역학적 변화	값 (kJ/mol)
Na	1차 이온화에너지		495
	2차 이온화에너지		4560
	승화열		109
Mg	1차 이온화에너지		735
	2차 이온화에너지		1445
	3차 이온화에너지		7730
	승화열		150
Cl	전자친화도	$Cl(g) + e^- \rightarrow Cl^-(g)$	-349
	해리에너지	$Cl_2(g) \rightarrow 2Cl(g)$	239
NaCl(s)	형성엔탈피		-411
MgCl ₂ (s)	형성엔탈피		-642
이온	Pauling의 이온 반경(pm)		
Na ⁺			95
Mg ²⁺			65
Cl ⁻			181

kJ/mol

(b) 위 표를 이용하여 NaCl의 격자에너지(Lattice energy)를 구하여라. (Born-Harber cycle 그럴 필요 없음)

kJ/mol

3. 가상의 이온화합물 NaCl₂(s) MgCl(s)이 있는데 NaCl₂는 MgCl₂와 마찬가지로 rutile 구조를 하고 MgCl은 NaCl과 마찬가지로 rock-salt 구조를 한다고 하자. Mg⁺이온의 반경은 Na⁺ 이온의 반경과 같고 Na²⁺ 이온의 반경은 Mg²⁺ 이온의 반경과 같다고 하자.

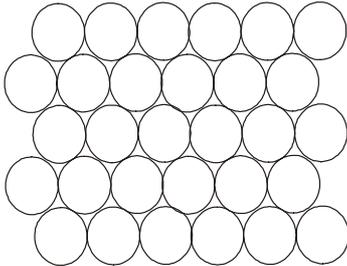
(a) 위의 문제 2에 있는 표를 이용하여 NaCl₂의 형성엔탈피(formation enthalpy)를 구하여라. (Rutile 구조의 Madelung 상수는 2.3850 이다.)

(c) (a), (b)의 결과와 위 문제 2의 표를 바탕으로 가상의 이온화합물 NaCl_2 와 MgCl 의 존재 가능성에 대하여 논하라.

kJ/mol

(b) 위의 문제 2에 있는 표를 이용하여 MgCl 의 형성엔탈피(formation enthalpy)를 구하여라. (NaCl 구조의 Madelung 상수는 1.74756 이다.)

4. 어떤 가상의 금속이 2차원 평면에서 보면 다음 그림과 같이 조밀쌓음(closed packing) 구조를 하고 이러한 구조가 AAAA..의 순서 형식으로 쌓여서 3차원 구조를 이룬다고 하자.



(a) 금속의 원자 반경을 r 이라고 할 때 이 금속 결정의 단위세포의 모양을 그려라. (단위세포를 정의하는 세 축의 길이와 세 각의 각도를 표시할 것.) 이 결정은 7개의 결정계 중에서 어디에 속하는가?

그림:

결정계:

(b) 위의 구조에서 공간 채움 비율은 몇 %인가?

kJ/mol

(b) 화합물 Mn_xF_y 의 조성식을 써라.

(c) 화합물 Mn_xF_y 에서 Mn 이온의 배위수와 배위구조는?

Mn의 배위수	배위구조

(d) Mn 이온이 자유이온 상태로 있을 때 d-오비탈들은 축퇴되어 있다. Mn 이온이 위의 구조를 할 때 d-오비탈들의 에너지 준위가 어떻게 갈라지는지 그려라. (갈라진 오비탈의 d-오비탈 이름, 정식 이름을 명확히 표시하라. 갈라진 오비탈의 에너지 준위가 축퇴된 d-오비탈의 에너지 준위에 비하여 얼마 만큼 증가 또는 감소하는지 Δ 단위로 표시하라.)

%

(c) 위의 구조에서 가능한 hole의 종류와 단위세포 안에 존재하는 hole의 수를 적어라. (줄 수는 필요이상으로 많이 만들어 놓았다.)

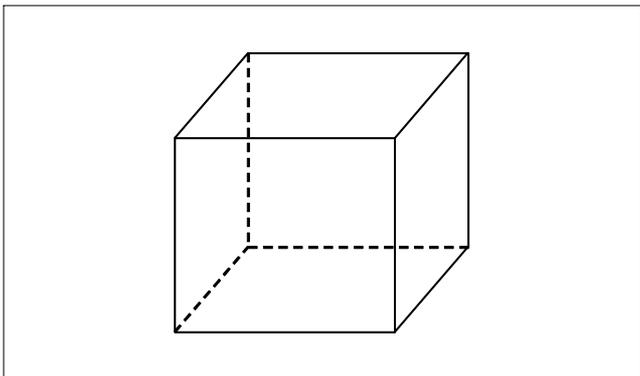
hole의 종류	단위세포 안의 개수
6배위 hole	

(d) 양이온 A와 음이온 B로 이루어져 있는 어떤 이온화합물에서 음이온은 위의 구조에서 금속이 차지하는 위치에 있고 양이온은 6배위 hole에 위치한다고 하자. (1) 음이온의 배위 구조는? (2) 이 화합물의 조성식은? (3) 음이온 B의 산화수가 -4이라면 양이온의 산화수는 어떻게 되겠는가?

음이온의 배위 구조	
화합물의 조성식	
양이온의 산화수	

5. 어떤 화합물 Mn_xF_y 의 고체 결정을 살펴보면 Mn 이온은 단순입방 (primitive cubic) 배열을 하고 F 음이온은 입방단위세포의 각 모서리의 가운데를 차지하는 구조를 가지고 있다.

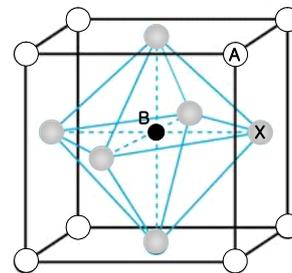
(a) 아래의 단위세포 그림위에 Mn과 F의 위치를 표시하라.



(e) F 이온은 약한장(weak field) 리간드이다. 위 구조에서 Mn 이온의 d 전자의 전자배치와 spin 양자수를 써라.

전자배치	
스핀양자수(S)	

6. 다음은 양이온 두 종류(A, B)와 음이온 한 종류(X)로 이루어진 어떤 이온화합물 결정의 단위세포(unit cell)를 나타낸 그림이다. 그림에서 단위세포는 정육면체이고 흰 구(球)와 검은색 구(球)는 양이온을, 회색 구(球)는 음이온을 나타낸다. 흰 구는 정육면체의 각 꼭지점에, 회색 구는 각 면(面)의 중앙에, 검은색 구는 정육면체의 중앙에 위치한다.



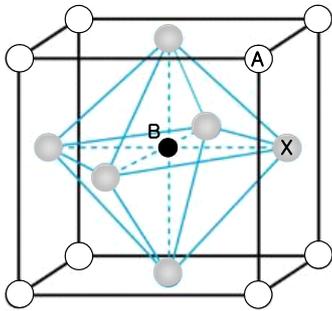
(a) 다음 중에서 이론적으로 가능한 양이온과 음이온의 산화수는 어느 것인지 보기에서 고르고 그 이유를 설명하여라.

	양이온(A, B)의 산화수	음이온(X)의 산화수
①	+2, +4	-2
②	+1, +3	-4
③	+3, +5	-4
④	+2, +2	-2

답:
이유:

(b) 위 이온화합물 구조의 이름은 무엇인가?

(c) 다음 그림 위에 motif로 작용될 수 있는 영역을 선택하여 폐곡선으로 표시하여라. 그리고 motif를 하나의 격자점으로 하였을 때 형성되는 격자의 구조는 14개의 Bravais Lattice 중 어느 것으로 설명될 수 있는가?



Bravais Lattice:

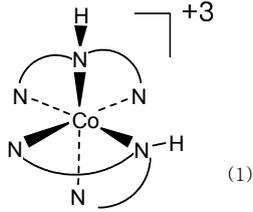
7. 다음 착물에 있어서 금속의 산화수, d-전자의 수 그리고 착물의 이름 또는 화학식을 써라.

착물	산화수	d-전자 수	이름
$[\text{Mn}(\text{CN})_6]^{4-}$			
			tetrachloroferrate(2-)
$[\text{Ni}(\text{en})_3]^{2+}$			
			hexaaquatitanium(III)
$[\text{Cr}(\text{acac})_3]$			

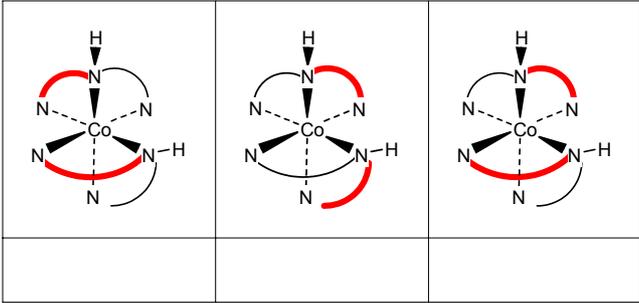
8. $\text{Pt}(\text{CO})_2(\text{PPh}_3)_2$ 는 평면사각형의 배위구조를 가진다. 가능한 두 이성질체를 그려라. IR과 ^{31}P NMR을 사용하여 두 이성질체를 구별하고자 한다. 가능한지 아닌지를 설명하여라.

이성질체 구조		
IR	(symmetric과 asymmetric의 두 CO stretching vibrational mode를 중심으로 설명할 것)	
^{31}P NMR		

9. $[\text{Co}(\text{dien})_2]^{3+}$ 는 여러 가지 형태의 이성질체를 가질 수 있다. 다음은 그 중 하나이다.



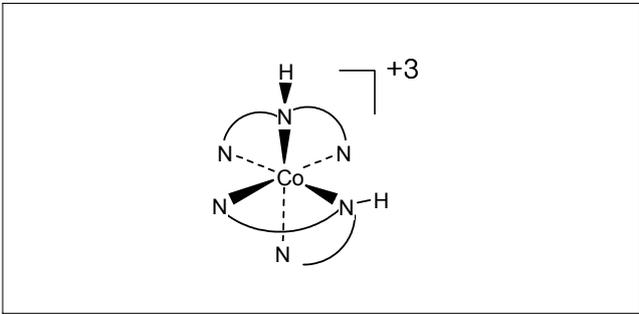
(a) 다음 굵은 선으로 표시한 고리의 쌓은 Δ 와 Λ 중 어느 chirality 관계에 있는가?



(b) (a)를 바탕으로 하였을 때 (1) 구조의 거울상은 어떻게 이름을 붙여야 하는가? (왼쪽에서 오른쪽으로 (a)의 순서를 따를 것)

_____ - $[\text{Co}(\text{dien})_2]^{3+}$

(c) (1)의 구조에서 6개의 N 원자 중에서 chiral center로 작용하는 N 원자가 있는가 또는 없는가 선택하여야. 있으면 모든 chiral N을 동그라미로 표시하고 옆에 R 또는 S로 chirality를 나타내어라. 없으면 "없음" 이라고 써라.



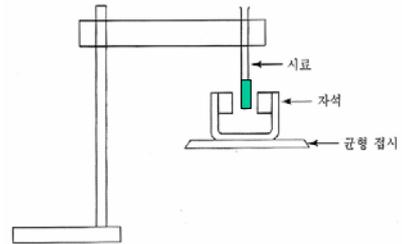
10. $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 는 모두 6배위 팔면체 배위 구조를 갖는다. ligand splitting parameter(Δ_o)가 큰 착물의 순으로 배열하여라. 그리고 그 이유를 써라.

순서:
이유:

11. 298K에서 $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 의 magnetic moment(μ_{eff})를 측정하였더니 $4.85 \mu_B$ 였다. $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 의 S 값과, d-전자 배치를 써라.

S = _____ , 전자배치 = _____

12. 다음 그림과 같은 Gouy 자기화율 측정장치에 $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ 와 $\text{K}_2[\text{NiCl}_4]$ 시료를 넣고 실험을 하였더니 $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ 의 경우는 균형점시의 질량이 증가하였고 $\text{K}_2[\text{NiCl}_4]$ 의 경우는 질량이 감소하였다. 그 이유를 원자가결합이론 (Valence Bond Theory)과 결정장이론(Crystal Field Theory)으로 자세히 설명하여라.



- 여러 가지 상수 -

Avogadro number = 6.022×10^{23}

$e^2/4\pi\epsilon_0 = 2.307 \times 10^{-28}$ Jm

Born-Mayer equation

$$\Delta U = \frac{N_A M z_+ z_-}{r_0} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \left(1 - \frac{\rho}{r_0} \right), \text{ 단, } \rho = 30 \text{ pm}$$