

(b) 위 표를 이용하여 MgCl₂의 격자에너지(Lattice energy)를 구하여라. (Born-Harber cycle도 그릴 것)

이름 _____

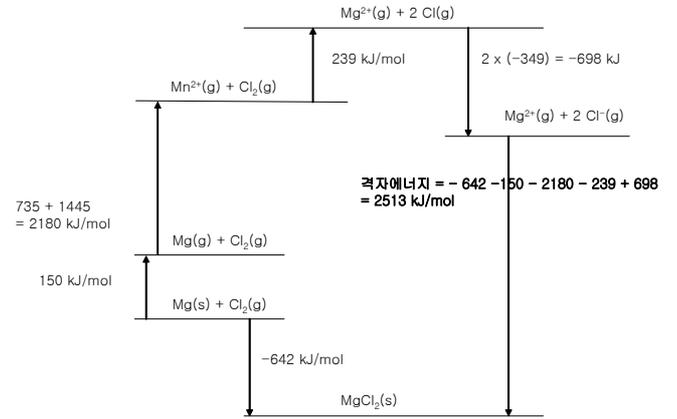
- 시험시간 10:00 - 13:00
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 휴대전화의 전원은 무조건 끌 것. 감독관의 눈에 전화기가 보이면 이유 여부를 막론하고 부정행위로 간주 함.
- 풀이에 필요한 여러 가지 상수 및 데이터는 마지막 쪽에 있음.
- 답은 주어진 네모 안에 적을 것. 빈 공간에는 풀이 과정을 적을 것.
- 문제수: 12, 시험지: 6쪽

1. 다음표의 빈칸을 채우시오. (2 x 24 =48점)

원자번호	원소 기호	이름	족 (Family)	주기 (Period)
12	Mg	Magnesium	2	3
24	Cr	Chromium	6	4
46	Pd	Palladium	10	5
76	Os	Osmium	8	6
90	Th	Thorium	Actinide	7
104	Rf	Rutherfordium	4	7

2. (a) 다음의 빈칸을 채워라. (2 x 9 + 5 + 5 = 28점)

원소 또는 화합물	열역학 성질	열역학적 변화	값 (kJ/mol)
Na	1차 이온화에너지	$Na(g) \rightarrow Na^+(g) + e^-$	495
	2차 이온화에너지	$Na^+(g) \rightarrow Na^{++}(g) + e^-$	4560
	승화열	$Na(s) \rightarrow Na(g)$	109
Mg	1차 이온화에너지	$Mg(g) \rightarrow Mg^+(g) + e^-$	735
	2차 이온화에너지	$Mg^+(g) \rightarrow Mg^{++}(g) + e^-$	1445
	3차 이온화에너지	$Mg^{++}(g) \rightarrow Mg^{+++}(g) + e^-$	7730
	승화열	$Mg(s) \rightarrow Mg(g)$	150
Cl	전자친화도	$Cl(g) + e^- \rightarrow Cl^-(g)$	-349
	해리에너지	$Cl_2(g) \rightarrow 2Cl(g)$	239
NaCl(s)	형성엔탈피	$Na(s) + \frac{1}{2} Cl_2(g) \rightarrow NaCl(s)$	-411
MgCl ₂ (s)	형성엔탈피	$Mg(s) + Cl_2(g) \rightarrow MgCl_2(s)$	-642
이온	Pauling의 이온 반경(pm)		
Na ⁺			95
Mg ⁺⁺			65
Cl ⁻			181



-2513 kJ/mol

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

$$411 + 109 + 495 + (1/2) \times 239 - 349 + \text{격자에너지} = 0$$

따라서

$$\text{격자에너지} = -786 \text{ kJ/mol}$$

-786 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 Na⁺⁺이온의 반경은 Mg⁺⁺이온의 반경과 같다고 하자. (10 + 10 + 5 = 25점)

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

$$r_o = 65 + 181 \text{ pm} = 246 \text{ pm}$$

NaCl₂의 격자에너지(ΔU)는

$$\begin{aligned} \Delta U &= \frac{N_A M z_+ z_-}{r_o} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \left(1 - \frac{\rho}{r_o} \right) \\ &= \frac{(6.022 \times 10^{23} / \text{mol})(2.3850)(2)(-1)}{246 \times 10^{-12} \text{ m}} [2.307 \times 10^{-28} \text{ J} \cdot \text{m}] \left(1 - \frac{30 \times 10^{-12} \text{ m}}{246 \times 10^{-12} \text{ m}} \right) \\ &= -2365 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Born-Harber cycle에서

$$\Delta H_{\text{sublimation}}(\text{Na(s)}) + 1\text{st IE}(\text{Na(g)}) + 2\text{nd IE}(\text{Na(g)}) + \Delta H_{\text{dissociation}}(\text{Cl}_2(\text{g})) + 2 \times \text{EA}(\text{Cl}(\text{g})) + \Delta U(\text{NaCl}_2(\text{s})) - \Delta H_{\text{formation}}(\text{NaCl}_2(\text{s})) = 0$$

따라서,

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{formation}}(\text{NaCl}_2(\text{s})) &= \Delta H_{\text{sublimation}}(\text{Na(s)}) + 1\text{st IE}(\text{Na(g)}) + 2\text{nd IE}(\text{Na(g)}) \\ &+ \Delta H_{\text{dissociation}}(\text{Cl}_2(\text{g})) + 2 \times \text{EA}(\text{Cl}(\text{g})) + \Delta U(\text{NaCl}_2(\text{s})) \\ &= 109 + 495 + 4560 + 239 - 2 \times 349 - 2365 \\ &= 2340 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

2340 kJ/mol

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

$$r_0 = 95 + 181 \text{ pm} = 276 \text{ pm}$$

MgCl의 격자에너지(ΔU)는

$$\begin{aligned} \Delta U &= \frac{N_A M z_+ z_-}{r_0} \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \left(1 - \frac{\rho}{r_0} \right) \\ &= \frac{(6.022 \times 10^{23} / \text{mol})(1.74756)(1)(-1)}{276 \times 10^{-12} \text{ m}} [2.307 \times 10^{-28} \text{ J} \cdot \text{m}] \left(1 - \frac{30 \times 10^{-12} \text{ m}}{276 \times 10^{-12} \text{ m}} \right) \\ &= -784 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Born-Harber cycle에서

$$\Delta H_{\text{sublimation}}(\text{Mg(s)}) + 1\text{st IE}(\text{Mg(g)}) + (1/2) \times \Delta H_{\text{dissociation}}(\text{Cl}_2(\text{g})) + \text{EA}(\text{Cl}(\text{g})) + \Delta U(\text{MgCl}(\text{s})) - \Delta H_{\text{formation}}(\text{MgCl}(\text{s})) = 0$$

따라서,

$$\begin{aligned} \Delta H_{\text{formation}}(\text{MgCl}(\text{s})) &= \Delta H_{\text{sublimation}}(\text{Mg(s)}) + 1\text{st IE}(\text{Mg(g)}) \\ &+ (1/2) \times \Delta H_{\text{dissociation}}(\text{Cl}_2(\text{g})) + \text{EA}(\text{Cl}(\text{g})) + \Delta U(\text{MgCl}(\text{s})) \\ &= 150 + 735 + (1/2) \times 239 - 349 - 784 \\ &= -129 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

-129 kJ/mol

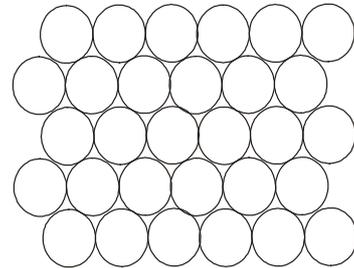
(c) (a), (b)의 결과와 위 문제 2의 표를 바탕으로 가상의 이온화합물 NaCl₂와 MgCl의 존재 가능성에 대하여 논하라.

NaCl₂(s)의 형성엔탈피는 2340 kJ/mol로서 매우 큰 양의 값이다. 따라서 NaCl₂(s)은 존재하기 어려울 것으로 판단된다. 이는 Na(s)에서 Na⁺⁺(g)까지 변하는 과정에서 필요한 엔탈피 변화량(109+495+4560 kJ/mol)이 너무 커서 Cl의 전자친화도(-2x329 kJ)와 NaCl(s)의 격자에너지(-2365 kJ/mol)가 이를 극복할 수 없기 때문이다.

MgCl(s)의 형성엔탈피는 -129 kJ/mol로서 어느 정도의 음의 값을 갖는다. 따라서, 존재할 수 있을 것으로 판단된다. 그러나 형성과정에서 훨씬 더 안정한 형태인 MgCl₂(s) (형성엔탈피 = -642 kJ/mol)로 계속 변하여 MgCl(s)의 형태로는 분리하기는 어려울 것이다.

(참고: 실제로 MgCl은 2원자 분자로서 높은 온도에서 기체의 형태로 관측됨.)

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. (10 + 10 + 10 + 3 x 3 = 39점)

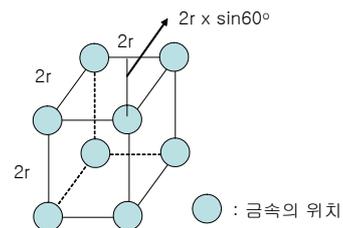


(a) 금속의 원자 반경을 r이라고 할 때 이 금속 결정의 단위세포의 모양을 그려라. (단위세포를 정의하는 세 축의 길이와 세 각의 각도를 표시할 것.) 이 결정은 7개의 결정계 중에서 어디에 속하는가?

그림:

결정계: 육방정계 (hexagonal)

(b) 위의 구조에서 공간 채움 비율은 몇 %인가?



단위세포 윗면의 높이 = $2r \times \sin 60^\circ = \sqrt{3}r$

따라서 단위세포의 부피 = $\sqrt{3}r \times 2r \times 2r = 4\sqrt{3}r^3$

단위세포 안에 있는 구의 수 = 1

단위세포 안에 있는 구의 부피 = $\frac{4}{3}\pi r^3$

따라서

공간 채움 비율 =

$$\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{4\sqrt{3}r^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi}{4\sqrt{3}} = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} = 0.605 = 60.5\%$$

60.5 %

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

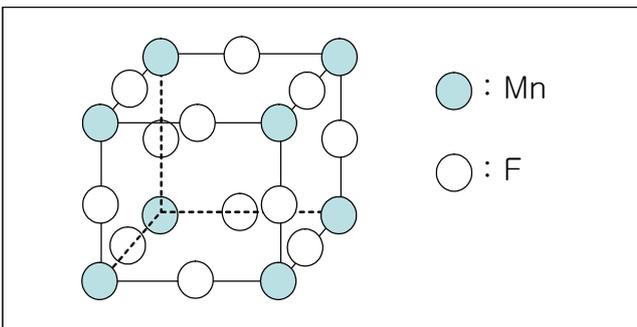
hole의 종류	단위세포 안의 개수
6배위 hole	2
3배위 hole	2
4배위 hole	2

(d) 양이온 A와 음이온 B로 이루어져 있는 어떤 이온화합물에서 음이온은 위의 구조에서 급속이 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	육각프리즘
화합물의 조성식	A_2B
양이온의 산화수	+2

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. ($5 + 3 + 3 \times 2 + 10 + 3 \times 2 = 30$ 점)

(a) 아래의 단위세포 그림위에 Mn과 F의 위치를 표시하라.



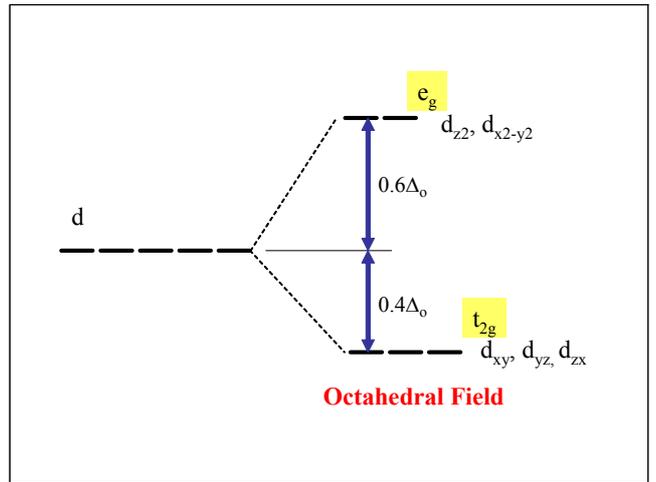
(b) 화합물 Mn_xF_y 의 조성식을 써라.



(c) 화합물 Mn_xF_y 에서 Mn 이온의 배위수와 배위구조는?

Mn의 배위수	배위구조
6	정팔면체 (octahedral)

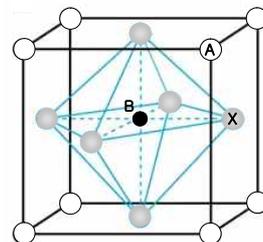
(d) Mn 이온이 자유이온 상태로 있을 때 d-오비탈들은 축퇴되어 있다. Mn 이온이 위의 구조를 할 때 d-오비탈들의 에너지 준위가 어떻게 갈라지는지 그려라. (갈라진 오비탈의 d-오비탈 이름, 정식 이름을 명확히 표시하라. 갈라진 오비탈의 에너지 준위가 축퇴된 d-오비탈의 에너지 준위에 비하여 얼마 만큼 증가 또는 감소하는지 Δ_o 단위로 표시하라.)



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

전자배치	$t_{2g}^3 e_g^1$
스핀양자수(S)	2

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. (10 + 3 + 10 = 23점)



(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: ①

이유:

단위세포안에 존재하는 양이온 A의 수 = $1/8 \times 8 = 1$ 개

단위세포안에 존재하는 양이온 B의 수 = 1개

단위세포안에 존재하는 음이온 X의 수 = $1/2 \times 6 = 3$ 개

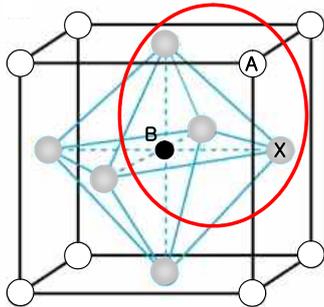
따라서 그림의 이온화합물의 조성식은 ABX_3 이다.

이온화합물은 전하가 중성이어야 하므로 (A의 산화수) + (B의 산화수) + (X의 산화수) $\times 3 = 0$ 이어야 한다. 주어진 보기에서 가능한 산화수의 조합은 ① 뿐이다.

(b) 위 이온화합물 구조의 이름은 무엇인가?

페로브스카이트 구조(perovskite structure)

(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: 단순입방격자(primitive cubic)

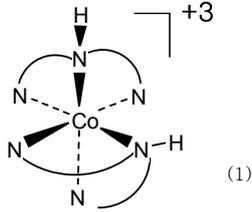
7. 다음 착물에 있어서 금속의 산화수, d-전자의 수 그리고 착물의 이름 또는 화학식을 써라. (2 x 15 = 30점)

착물	산화수	d-전자 수	이름
$[\text{Mn}(\text{CN})_6]^{4-}$	+2	5	hexacyanomanganate(II) 또는 hexacyanomanganate(4-)
$[\text{FeCl}_4]^{2-}$	+2	6	tetrachloroferrate(2-)
$[\text{Ni}(\text{en})_3]^{2+}$	+2	8	tris(ethylenediamine)nickel(II) 또는 tris(ethylenediamine)nickel(2+)
$[\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$	+3	1	hexaaquatitanium(III)
$[\text{Cr}(\text{acac})_3]$	+3	3	triacetylacetonatochromium(III) 또는 triacetylacetonatochromium(III)

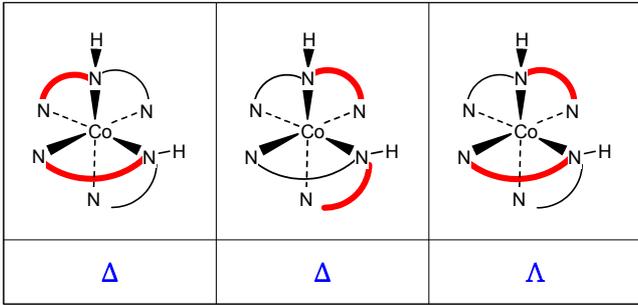
8. $\text{Pt}(\text{CO})_2(\text{PPh}_3)_2$ 는 평면사각형의 배위구조를 가진다. 가능한 두 이성질체를 그려라. IR과 ^{31}P NMR을 사용하여 두 이성질체를 구별하고자 한다. 가능한지 아닌지를 설명하여라. (5 + 5 + 10 + 10 = 30점)

이성질체 구조	
<p style="text-align: center;"><i>trans</i></p>	<p style="text-align: center;"><i>cis</i></p>
IR	<p>(symmetric과 asymmetric의 두 CO stretching vibrational mode를 중심으로 설명할 것)</p> <p><i>trans</i> 화합물에서 symmetric CO stretching vibrational mode는 IR-inactive하지만 Raman-active하다. 반면에 asymmetric CO stretching vibrational mode는 IR-active하지만 Raman-inactive하다. 따라서 <i>trans</i> 화합물의 IR 스펙트럼에서는 1개의 CO stretching vibrational mode가 관측된다.</p> <p><i>cis</i> 화합물에서는 symmetric과 asymmetric CO stretching vibrational mode 모두 IR-active, Raman-active 하다. 따라서 <i>cis</i> 화합물의 IR 스펙트럼에서는 2개의 CO stretching vibrational mode가 관측된다.</p>
^{31}P NMR	<p><i>trans</i>, <i>cis</i> 화합물 각각에서 두 P 원자의 주변 환경은 완전히 같다. 따라서 하나의 ^{31}P 피크가 관측되므로 구별하기 어렵다. (실제로는 구별 가능하다. 왜냐하면 ^{195}Pt가 $I=1/2$의 핵 스핀을 가지고 있기 때문에 P 핵과 Pt 핵 사이의 J-coupling을 이용하면 구별할 수도 있다. 문제에서는 그 수준까지 요구하는 것은 아니나 구별 가능하다고 답안을 작성하였을 경우에는 J-coupling을 언급해야 함)</p>

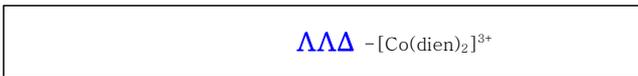
9. $[\text{Co}(\text{dien})_2]^{3+}$ 는 여러 가지 형태의 이성질체를 가질 수 있다. 다음은 그 중 하나이다. (2 x 3 + 5 + 5 = 16점)



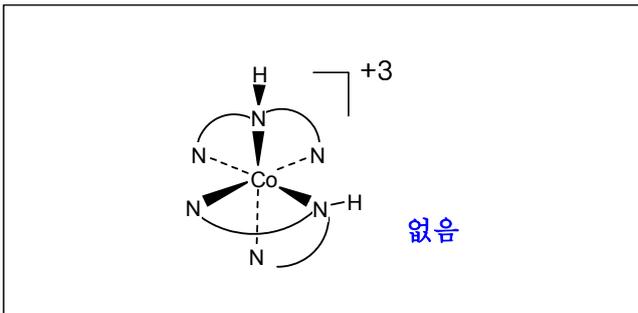
(a) 다음 굵은 선으로 표시한 고리의 쌍은 Δ 와 Λ 중 어느 chirality 관계에 있는가?



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



(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_0)가 큰 착물의 순으로 배열하여라. 그리고 그 이유를 써라. (10점)

순서: $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-} > [\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-} > [\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$
 이유: spectrochemical series에 따르면 같은 금속 이온에 대하여 π -받개 리간드일수록 Δ_0 가 더 크다. $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$, $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ 두 착물에서 금속은 모두 Fe^{2+} 이고 CN^- 는 π -받개 리간드이고 H_2O 는 π -받개 리간드로 작용하지 않으므로 두 착물에서 Δ_0 는 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-} > [\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ 이다. 같은 금속, 배위구조, 리간드를 같은 착물의 경우 Δ_0 는 금속의 산화수가 클수록 더 크다. $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 에서 금속이온은 Fe^{3+} 이므로 Δ_0 는 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-} > [\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 이다. 따라서 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-} > [\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-} > [\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ 이다.

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. (10점)

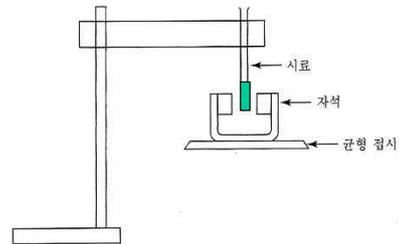
$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 에서 Cr은 +2의 산화수를 갖는다. 따라서 d^4 전자를 가진다. 따라서 약한장(high-spin 전자배치)의 경우 $t_2g^3e_g^1$ 의 전자배치를 하고 $S=2$ 이다. 센장(low-spin 전자배치)의 경우 t_2g^4 의 전자배치를 하고 $S=1$ 이다.

$\mu_{\text{eff}} = g \sqrt{S(S+1)} \mu_B = 2 \sqrt{S(S+1)} \mu_B$ 이므로
 센장일 경우
 $\mu_{\text{eff}} = 2 \sqrt{S(S+1)} \mu_B = 2 \sqrt{1(1+1)} \mu_B = 2.83 \mu_B$
 약한장일 경우
 $\mu_{\text{eff}} = 2 \sqrt{S(S+1)} \mu_B = 2 \sqrt{2(2+1)} \mu_B = 4.90 \mu_B$

$[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$ 은 약한장의 환경에 놓여있다. 즉

$S = 2$, 전자배치 = $t_2g^3e_g^1$

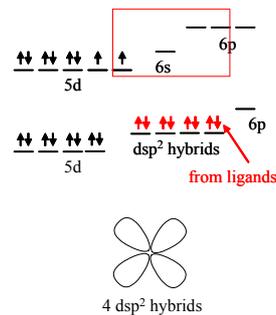
12. 다음 그림과 같은 Gouy 자기화율 측정장치에 $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ 와 $\text{K}_2[\text{NiCl}_4]$ 시료를 넣고 실험을 하였더니 $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ 의 경우는 균형점시의 질량이 증가하였고 $\text{K}_2[\text{NiCl}_4]$ 의 경우는 질량이 감소하였다. 그 이유를 원자가결합이론(Valence Bond Theory)과 결정장이론(Crystal Field Theory)으로 자세히 설명하여라. (20점)



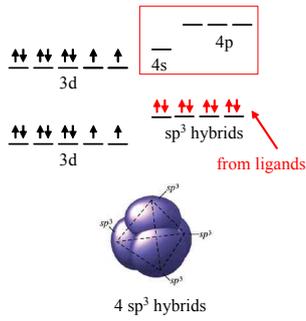
$\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ 의 경우는 균형점시의 질량이 증가하였으므로 시료와 자석 사이에 반발력이 작용하였다. 따라서 $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ 는 반자기성(diamagnetic) 물질이다. 반면에 $\text{K}_2[\text{NiCl}_4]$ 의 경우는 질량이 감소하였으므로 시료와 자석 사이에 인력이 작용하였다. 따라서 $\text{K}_2[\text{NiCl}_4]$ 는 상자기성(paramagnetic) 물질이다.

$[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 와 $[\text{NiCl}_4]^{2-}$ 에서 금속이온 Pt^{2+} 와 Ni^{2+} 는 둘 다 d^8 전자를 갖는데 위와 같은 자기적 성질의 차이를 보이는 것은 그 구조로 설명할 수 있다. 즉 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 는 평면사각형의 배위구조를 하고 $[\text{NiCl}_4]^{2-}$ 는 정사면체 배위구조를 하기 때문이다.

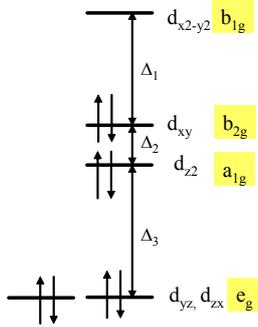
원자가결합이론에 의하면 $\text{Pt}^{2+}([\text{Xe}4f^{14}5d^8])$ 에서는 Pt의 5d 오비탈 하나, 6s 오비탈, 6p 오비탈 두 개가 혼성하여 평면사각형으로 배열된 네 개의 d_{sp^2} 혼성오비탈이 생긴다. 이 때 Pt와 Cl 사이의 강한 결합에 의하여 5d 오비탈에 있던 홀전자(unpaired electron) 하나가 5d 오비탈에 있는 다른 홀전자와 쌍을 이루고 d_{sp^2} 혼성오비탈에는 리간드로부터 온 네 쌍의 전자가 채워지면서 Pt와 Cl이 결합하게 된다. 따라서 홀전자가 없으므로 $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ 는 반자기성이 된다.



Ni^{2+} ($[Ar]3d^8$)에서는 Ni의 4s 오비탈, 4p 세 개가 혼성하여 정사면체 모양으로 배열된 네 개의 sp^3 혼성오비탈이 생기고 sp^3 혼성오비탈에는 리간드로부터의 온 네 쌍의 전자가 채워지면서 Ni과 Cl이 결합하게 된다. 따라서 3d 오비탈의 전자배치는 Cl과의 결합과 상관없이 홀전자가 두 개가 있게 되어 상자성이 된다.

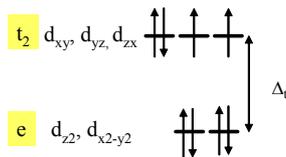


결정장이론에 의하면 전이 금속이온이 평면사각형의 배위구조를 하면 이온의 d 오비탈은 다음 그림과 같이 4 종류의 오비탈로 갈라진다.



일반적으로 평면사각형 배위구조 구조에서 $\Delta_1 \gg \Delta_2, \Delta_3$ 이므로 8개의 d-전자들은 에너지 준위가 낮은 오비탈부터 차 들어가게 되어 홀전자가 발생하지 않는다. 따라서 $[PtCl_4]^{2-}$ 는 반자기성이 된다.

전이 금속이온이 정사면체의 배위구조를 하면 이온의 d 오비탈은 다음 그림과 같이 2 종류의 오비탈로 갈라진다.



따라서 8개의 d-전자들은 위 그림과 같이 $e^4t_2^4$ 의 전자배치를 하게 되어 2개의 홀전자(S=1)가 발생한다. 따라서 $[NiCl_4]^{2-}$ 는 상자성이 된다.

- 여러 가지 상수 -

Avogadro number = 6.022×10^{23}

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

Born-Mayer equation

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