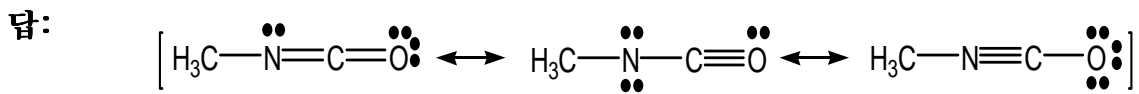


1. 인도 보팔에서 일어난 사고와 관련있는 A 화합물인 Methylisocyanate(CH<sub>3</sub>NCO) 및 화합물 B 에 대하여 다음 물음에 답하시오.(12점)



a) A의 루이스구조(Lewis electron dot)를 공명구조로 그려라.(6점)



b) A와 B 구조중 어떤 것이 더 안정한지를 형식전하를 계산하여 알수 있다. N, C, O 에 대한 형식전하를 계산하고, 어느 것이 안정한지 판단하시오.(6점)

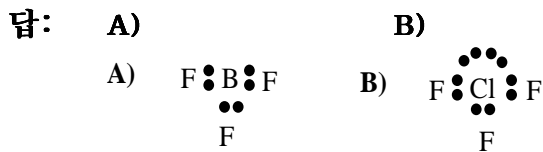
A)	N	C	O	B)	O	N	C
답:	5-5=0	4-4=0	6-6=0	6-5=1	5-4=1	4-6=-2	

형식전하 차이가 적은 A가 안정 함

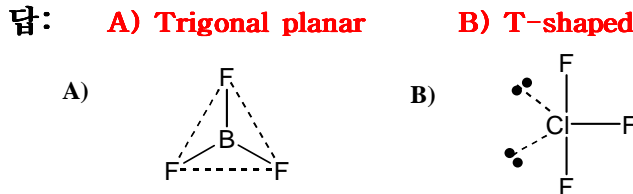
2. 다음 분자에 대하여 물음에 답하시오. (8점)



a) 위 분자들의 루이스구조를 그리시오.(2점)



b) 전자쌍 반발이론에 기초한 분자 구조를 그리시오.(2점)



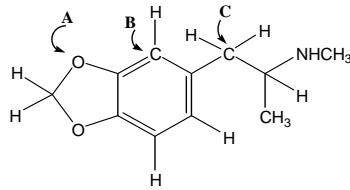
c) 위 분자들의 쌍극자모멘트(dipole moment) 유무를 말하시오.(2점)



d) 끓는점이 낮다고 예상되는 분자는 무엇이며, 그 이유는?(2점)

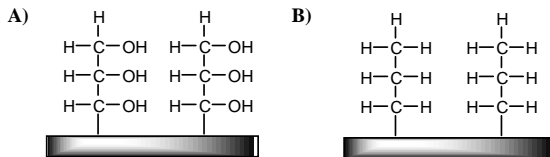


3. 다음 화합물은 항간에 물의를 빚고 있는 마약인 엑스타시(ecstasy)의 구조식은 다음과 같다. 실선은 C-C 단일 결합을 나타내며 각 탄소에는 수소가 결합되어 있다. (단, C 탄소에는 두 개의 H, B 탄소에는 한 개의 H가 붙어있음) A, B, C 의 결합전자쌍, 비공유 전자쌍 개수 및 입체수(Steric Number)를 쓰시오.(9점)



답:	결합전자쌍	비공유 전자쌍	입체수(Steric Number)
A:	2	2	4
B:	4	0	3
C:	4	0	4

4. 글리세롤기 ( $C_3H_7O_3^-$ , A) 및 프로필기 ( $C_3H_7^-$ , B)로 코팅된 표면에 물을 떨어뜨렸을 때 물방울이 상대적으로 더 둥그랗게 맺히는 표면은 무엇이며, 그 이유는 ?.(5점)



답: B) A는 물과 수소결합을 하므로 친수성이며 B는 소수성임

5. Ar 2몰이 50 °C에서 낮은 압력으로 용기에 저장 되어 있다. 아래의 변화에 대한 1) 압력 2) 한 원자당  $E_{kin}$  (평균 운동 에너지) 3)  $u_{rms}$ (root mean square speed)의 영향을 정성적으로 예측하시오.(9점)

	압력	$E_{kin}$	$u_{rms}$
a) 온도가 -50 °C 이하			
답:	223/323	223/323	$(223/323)^{1/2}$
b) 부피가 2배로 증가			
답:	1/2	1	1
c) Ar의 양이 3몰로 증가			
답:	3/2	1	1

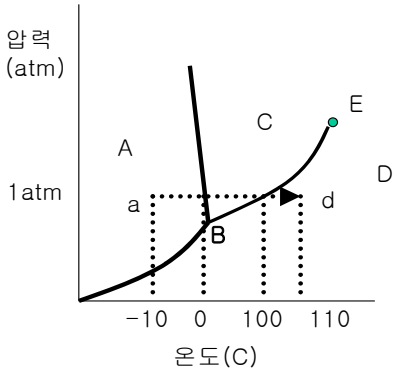
6. 반데르발스식은 실제기체에 대한 압력(P),부피(V), 및 온도(T)의 관계식이다.

$$\left(P + \frac{a n^2}{V^2}\right)(V - nb) = nRT$$

메탄( $CH_4$ )과 헬륨(He)에 대한 a, b 값들은 차이를 보인다. 그 이유를 설명하시오.(5점)

답: vdW 힘은 분자 크기에 비례하므로 메탄-메탄 분간 힘이 더 크므로 a,b 모두 메탄이 더 큼

7. 아래 그림은 어떤 물질의 상평형도(Phase diagram)이다. 다음 물음에 답하시오.(16점)



용융엔탈피(Enthalpy of fusion) = 10 kJ/mol

기화엔탈피(Enthalpy of vaporization) = 40 kJ/mol

정압비열(Molar heat capacities at constant P)

gas:  $40 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot (\text{C})^{-1}$

liquid:  $80 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot (\text{C})^{-1}$

solid:  $100 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot (\text{C})^{-1}$

a) 대기압에서 이 물질의 끓는점은 몇도인가? 그 이유는?(3점)

답: 100도(1점), 증기압이 대기압인 1atm와 같아지는 온도임(2점)

b) E점을 무엇이라 하며 이 상태에서 물질의 특징적인 성질(밀도, 점성도등)중 하나만 C, D 상과 비교하여라. (3점)

답: 초임계유체(supercritical fluid)(1점),

밀도는 C(액체)와 유사함 혹은 점성도는 D(기체) 유사함(2점).

c) 위 상평형도에서 이 물질 1몰을 a에서 출발하여 d로 이동시키는데 드는 열량을 계산하시오.(10점)

(a 지점:  $-10 \text{ C}$ , 1기압 / d 지점:  $110 \text{ C}$ , 1기압)

답: heating solid  $q = nc\Delta T = 1 \times 100 \times 10 = 1000 \text{ J} = 1 \text{ kJ}$  (2점)

solid to liquid  $q = n\Delta H_{\text{fus}} = 1 \times 10 \text{ kJ}$  (2점)

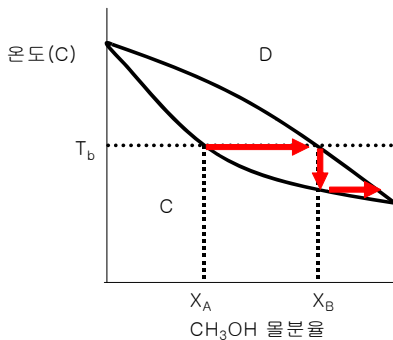
heating liquid  $q = nc\Delta T = 1 \times 80 \times 100 = 8000 \text{ J} = 8 \text{ kJ}$  (2점)

liquid to gas  $q = n\Delta H_{\text{vap}} = 1 \times 40 = 40 \text{ kJ}$  (2점)

heating gas  $q = nc\Delta T = 1 \times 40 \times 10 = 400 \text{ J} = 0.4 \text{ kJ}$  (2점)

Total amount of heat =  $1 + 10 + 8 + 40 + 0.4 = 59.4 \text{ kJ}$

8. 다음은 메탄올(CH<sub>3</sub>OH)과 물(H<sub>2</sub>O)의 혼합물에 대한 온도대 메탄올 몰분율 그림이다.(14점)



a) 위의 그림으로부터 어느 화합물이 증기압이 큰지 말하십시오.(2점)

답: 메탄올, bp 가 낮음

b) C, D는 각각 무슨 상(Phase)인가?(2점)

답: C: 액체 D: 기체

c) T<sub>b</sub>, X<sub>A</sub>, X<sub>B</sub>는 각각 무엇을 나타내는가?(6점)

답: T<sub>b</sub>: 용액의 끓는점

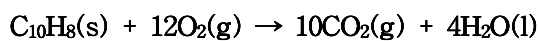
X<sub>A</sub>: 이용액의 조성 혹은 메탄올 몰분율

X<sub>B</sub>: 이용액 위의 기체상에서 조성 혹은 메탄올 몰분율

d) 분별 증류기를 이용하여 위 혼합물을 분류하였을 때 콘덴서를 통하여 모아진 액체에는 무엇이 주된 화합물인가? 그 과정(증발, 응축)을 위 그림에 화살표로 표기하십시오(4점).

답: 메탄올, 기체상에 메탄올이 상대적으로 많음

9. 다음과 같은 반응에 대하여 1몰의 나프탈렌(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>)을 태워 나오는 열량을 bomb calorimeter를 이용하여 측정하였더니 q = -5157 kJ/mol 이었다. 다음 물음에 답하십시오.(6점) (단, R = 8.31 J · mol<sup>-1</sup> · K<sup>-1</sup>)



a) 이 반응에 대한 표준상태에서 엔탈피 변화 ΔH°는?(3점)

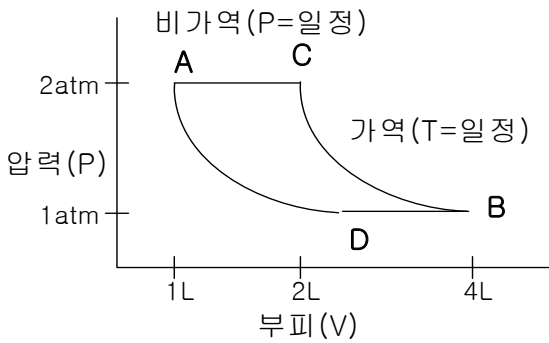
$$\begin{aligned} \text{답: } \Delta H^\circ &= \Delta E^\circ + \Delta PV = \Delta E^\circ + \Delta(nRT) \\ &= -5157\text{kJ} + (-2 \times 8.31 \times 298)\text{J} = -5162 \text{ kJ} \end{aligned}$$

b) 나프탈렌의 형성 엔탈피 변화 ΔH<sub>f</sub>° (Enthalpy of formation)는?(3점)

	CO <sub>2</sub> (g)	H <sub>2</sub> O(l)	O <sub>2</sub> (g)
ΔH <sub>f</sub> ° (kJ/mol)	-394	-286	0

$$\begin{aligned} \text{답: } \Delta H^\circ &= \Delta H^\circ(\text{P}) - \Delta H^\circ(\text{R}) = -5162 \text{ kJ} \\ &= -(10 \times 394) - 4 \times 286 - \Delta H_{\text{f(naphthalene)}}^\circ - (12 \times 0) \\ \Delta H_{\text{f(naphthalene)}}^\circ &= 78 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

10. 아래 그림과 같은 과정에 대하여 다음 물음에 답하시오.(16점)



A 상태의 계 ( $P_A = 2 \text{ atm}$ ,  $V_A = 1 \text{ L}$ )의 단분자 이상기체를 일정 압력하에서(isobaric) 비가역적(irreversible)으로 팽창시켜서 C 상태( $P_C = 2 \text{ atm}$ ,  $V_C = 2 \text{ L}$ )에 도달한 후, 일정 온도에서(isothermal) 가역적으로(reversible) 팽창시켜 B 상태( $P_B = 1 \text{ atm}$ ,  $V_B = 4 \text{ L}$ )에 도달하였다.

a) 비가역 A-C 과정에 대하여 아래의 열역학적 양들을 구하시오.(L · atm)(6점)

**답:**  $w_{AC} = -P_C(V_C - V_A) = -2 \text{ atm}(2 - 1)\text{L} = -2 \text{ Latm}$  (2점)

$q_{AC} = n c_p(T_C - T_A) = 2.5(P_C V_C - P_A V_A) = 2.5(2 \times 2 - 2 \times 1) = 5 \text{ Latm}$  (2점)

$\Delta E = w_{AC} + q_{AC} = 3 \text{ Latm}$  (1점)

$\Delta H = q_{AC} = 5 \text{ Latm}$  (1점)

b) 가역 C-B 과정에 대하여 다음 양들을 구하시오.(L · atm)(6점)

(단,  $\ln 2 = 0.69$ ).

**답:**  $w_{CB} = -nRT_C \ln(V_B/V_C) = -P_C V_C \ln(V_B/V_C) = -2 \times 2 \ln(4/2) = -4 \ln 2 = -2.77 \text{ Latm}$  (2점)

$q_{CB} = -w_{AC} = 2.77 \text{ Latm}$  (2점)

$\Delta E = n c_v \Delta T = 0$  (1점)

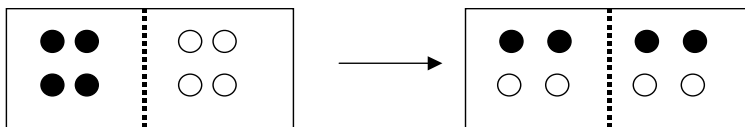
$\Delta H = n c_p \Delta T = 0$  (1점)

c) ADB 과정에 대한  $\Delta E$ 를 ACB 과정에 대한 값들을 이용하여 구할 수 있다. 그 이유를 말하고, 그 값을 구하시오.(4점)

**답:** 상태함수이므로 경로에 상관 없이 처음과 마지막 상태만 알면 되므로.(2점)  $\Delta E = 3 \text{ Latm}$  (2점)

1. (10점) 일정 온도, 압력하에 있는 같은 부피의 용기에 있는 이상기체인 4 mol의 까만 분자와 4 mol의 하얀 분자가 섞이는 과정에 대한 엔트로피 변화를 계산하시오.

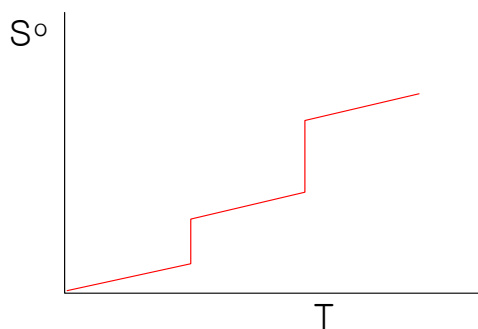
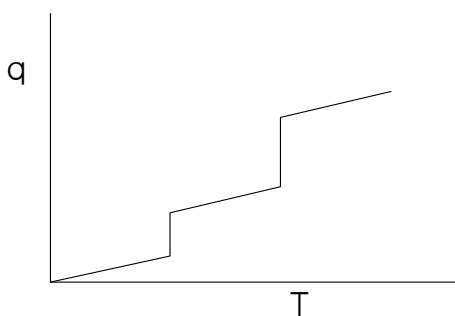
(연습문제 8-49에서  $\Delta S = -nR \sum X_i \ln X_i$ ,  $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ,  $\ln 2 = 0.693$ )



답:  $\Delta S = -(8 \times 8.314) [(1/2)\ln(1/2) + (1/2)\ln(1/2)]$   
 $= 8 \times 8.314 \times \ln 2 = 46.1 \text{ J/K}$

2. (5점) 다음은 어떤 물질의 고체-액체-기체의 상전이(Phase transition)중 흡수되는 열량(q)과 온도(T)에 대한 그래프이다. 이를 참고하여 1 기압하에서 이 물질의 표준엔트로피( $S^\circ$ ) 대 온도(T) 그래프를 그리시오.

답:

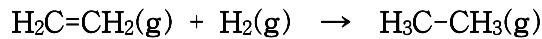


3. (5점) 이상기체를 일정 온도에서 일정압력에 대하여 팽창시킬 때(isothermal expansion) 계에 대한 다음 열역학적양들의 변화 중 틀린 것을 있는 대로 고르시오.

- a)  $w < 0$       b)  $q > 0$       c)  $\Delta E < 0$       d)  $\Delta S < 0$

답: c, d

4. (5점) 다음 반응이 자발적으로 일어나려면( $\Delta G < 0$ ), 어떤 온도 조건에서 일어나겠는가를 예상하시오.

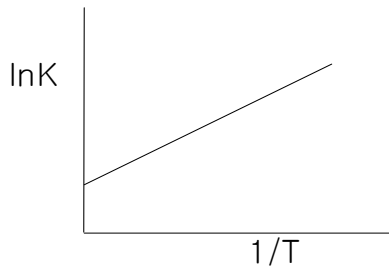
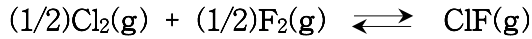


$\Delta H_f^\circ$  (kJ/mol)    52.26                  0                  -84.68

- a) 낮은 온도    b) 높은 온도    c) 모든 온도    d) 불가능

답: a:  $\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0$ :  $\Delta H < 0$   $\Delta S < 0$  이므로 Low T에서 가능

5. (10점) 1 atm하에서 아래 반응에 대한 평형상수(K)를 구한 다음  $\ln K$  대  $1/T$ 를 플롯하였더니 다음과 같은 그래프를 얻었다. 다음 물음에 답하시오.



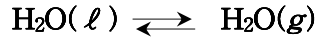
a) 이 그래프에서 절편(intercept), 기울기(slope)에 해당하는 열역학적인 양은 각각 무엇인가? (이 온도범위에서는  $\Delta H^\circ$ ,  $\Delta S^\circ$ 는 온도와 무관하다고 가정) (각 2점 = 4점)

답: 절편 =  $\Delta S^\circ/R$                   기울기 =  $-\Delta H^\circ/R$

b) 위 그래프로부터 예상한 이 반응에 대한 열역학적인 양들의 변화를 +, - 로 표시하시오. (각 2점 = 6점)

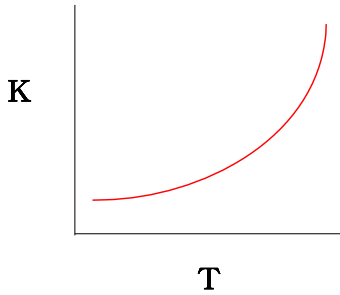
답:  $\Delta G^\circ = -$                    $\Delta H^\circ = -$                    $\Delta S^\circ = +$

6. (10점) 일정온도에서 물과 수증기가 평형을 이루고 있다. 다음 물음에 답하시오.



a) 평형에 대한 평형 상수  $K(T)$ 에 온도의 그래프로 그리시오. (4점)

답:



b) 온도  $T$ 에서의 수증기압  $P$ 를 구하는 식을 van't Hoff 식 [ $\ln K_2/K_1 = -\Delta H_{\text{vap}}/R(1/T_2 - 1/T_1)$ ] 을 응용하여 물의 기화엔탈피( $\Delta H_{\text{vap}}$ ), 끓는점( $T_b$ ), 기체상수( $R$ ) 로 나타내시오.(6점)

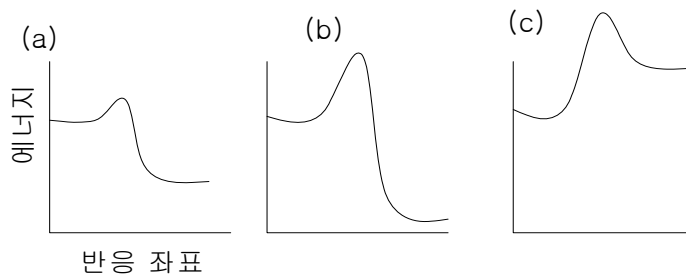
답:

$$\ln K_2/K_1 = -\Delta H_{\text{vap}}/R(1/T_2 - 1/T_1)$$

여기서  $K_2 = P$  at  $T$ ,  $K_1 = 1 \text{ atm}$  at  $T_b = 373\text{K}$

$$\ln P = -\Delta H_{\text{vap}}/R(1/T - 1/T_b)$$

7. (5점) 다음 반응경로들 중에서 에너지적(energetics)으로 불리하나 동역학적(kinetics)으로 유리한 반응은 ?



답: a



8. (5점) 다음과 같이 인체내에서 간알콜분해효소에 의하여 알콜(A)이 알데하이드로 분해되는 반응은 “0”차 반응이다. 이 반응에 대한 반감기( $t_{1/2}$ )를 구하시오.



답:  $-d[A]/dt = k$

$$d[A] = -k dt$$

$$\int_{A_0}^A d[A] = - \int_0^t k dt$$

$$[A] - [A]_0 = -kt$$

$$[A]_0/2 - [A]_0 = -kt_{1/2}$$

$$t_{1/2} = [A]_0/2k$$

9. (10점) 달걀을 물에 넣고 끓이면 완숙이 되는 것은 단백질의 변성(denaturation)반응 결과이다. 우리 학교에서 물이 끓는점이 100도이고 달걀 완숙이 되는데 걸리는 시간이 3분이었다. 계룡산 천황봉에서 물이 92도에서 끓는다면 완숙 달걀을 얻는데 걸리는 시간을 구하시오.

[단,  $k = A \exp(-E_a/RT)$ ,  $E_a$ (활성화 에너지 장벽) = 42 kJ · mol<sup>-1</sup>, R = 8.314 J · mol<sup>-1</sup> · K<sup>-1</sup>]

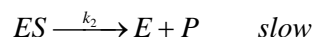
답:  $\ln k_2/k_1 = -E_a/R (1/T_2 - 1/T_1)$

$$\ln k_2/k_1 = -[(42 \times 10^3 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}) \div (8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})] (1/365\text{K} - 1/373\text{K})$$

$k_2/k_1 = 0.743$  따라서, 92도에서 속도상수  $k_2$ 는 100도에서 속도상수  $k_1$ 보다 0.743 배 작다.

따라서, 1/0.743 배 더 시간이 걸린다. 3분  $\times$  (1/0.743) = 4분

10. (5점) 우리 몸에서 일어나고 있는 효소반응의 전형적인 매커니즘을 쓰면 아래와 같다.



위 식에서 중간체인 효소-반응착물(ES)에 정류상태근사법(steady state approximation)을 사용하여 생성물(P)의 생성율(반응속도)을 효소의 농도(E)와 반응물(S)의 농도로써 나타내라.

답: 중간체(ES)의 생성을

$$\frac{d[ES]}{dt} = k_1[E][S] - k_{-1}[ES] - k_2[ES] = 0 \quad \text{정류상태 근사법 적용}$$

$$[ES] = \frac{k_1[E][S]}{k_{-1} + k_2}$$

따라서 생성물 P의 생성속도는,

$$\frac{d[P]}{dt} = k_2[ES] = \frac{k_1 k_2 [E][S]}{k_{-1} + k_2}$$

11. (4점) H원자의 emission spectra중 656nm 빛은 n=3에서 n=2 전이에서 유래한다. Li<sup>2+</sup>이온의 emission spectra에서 같은 파장의 빛을 내는 전이는? [  $E_n = -(Z^2/n^2)R_H$  ]

답: from n = 9 to n = 6

$$E = -(3^2/n^2)R_H = -(1^2/3^2)R_H$$

$$n^2 = 81 \quad n = 9$$

$$E = -(3^2/n^2)R_H = -(1^2/2^2)R_H$$

$$n^2 = 36 \quad n = 6$$

12. (4점) 일직선상에서 움직이는 어떤 A 원자(드브로이 파장,  $\lambda = 0.5 \text{ nm}$ )를 반대방향에서 500nm의 레이저를 쬐어서 멈추게 하려면, 몇 개의 photon이 필요한가?

답:  $p = h/\lambda$

$$h/0.5\text{nm} = N (h/500\text{nm})$$

$$N = 1000$$

13. (5점) lanthanide 원소들은 f-orbital에 전자를 채우기 시작한다. 다음 4d orbital을 참고하여 4f orbital의 node의 갯수를 말하고 방사전자밀도(radial distribution function)  $r^2R^2(r)$ 을 그리시오.

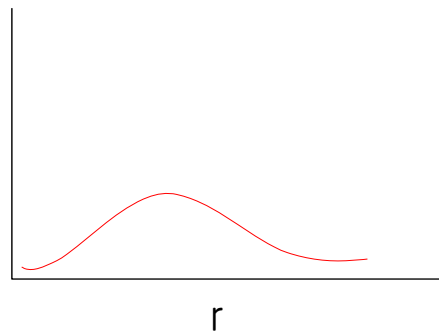
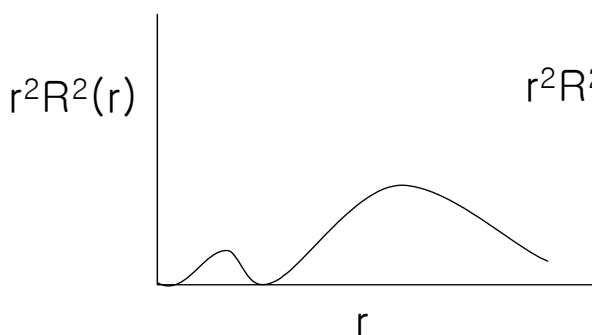
답: total number of nodes =  $n-1 = 3$ , (1점)

# of angular nodes(각마디) =  $\ell = 3$  (1점)

# of radial nodes(방사상마디) =  $n-1-\ell = 0$  (1점)

4d orbital 방사전자밀도

4f 오비탈의 방사전자밀도 그림? (2점)

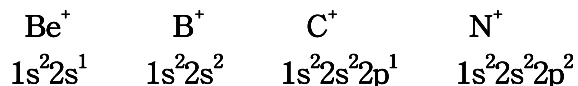


14. (5점) 다음과 같은 전자배치를 가지는 원자나 이온들 중 가장 낮은 이온화에너지 (ionization energy)를 갖는 원자는 ?

- a)  $H(2s^1)$     b)  $He(1s^13s^1)$     c)  $He^+(3s^1)$     d)  $Li(1s^24s^1)$

답: d:  $IE = (Z^2_{eff}/n^2)R_H = (1/4^2)R_H$

15. (12점) 다음 이온들의 전자배치를 참조하여 다음 물음에 답하시오.



a) 아래 각 이온들의 최외각 전자가 느끼는 유효핵전하( $Z_{eff}$ )를 계산하시오.(4점)

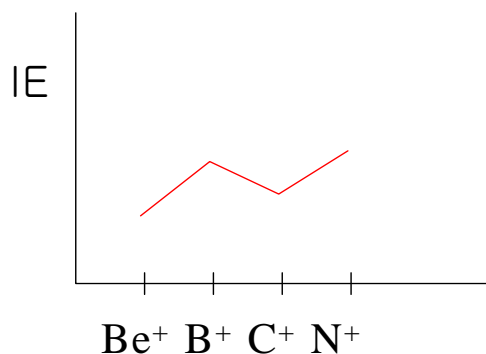
답:

이온	$Be^+$	$B^+$	$C^+$	$N^+$
$Z_{eff}$	$4-2=2$	$5-2=3$	$6-2=4$	$7-2=5$

b)  $B^+$  와  $C^+$ 이온의 이온화 에너지를 유효핵전하 ( $Z_{eff}$ ), 2s, 2p orbital 침투효과 (penetration) 차이를 이용하여 설명하시오.(3점)

답: C가 유효 핵전하는 더 크나, 2s orbital이 2p보다 핵에 대한 침투효과가 커 2s가 2p보다 더 큰 핵전하를 느끼므로 2s에서 전자를 떼어내는데 드는 이온화에너지가 더 크다.

c) 위 결과를 종합하여 이들 이온들의 이온화 에너지(각 원자의 2차 이온화에너지)의 정성적인 크기를 예상하여 다음 그래프에 나타내시오.(3점)



d) 위 이온들 중에서 diamagnetic(반자성) 성질을 보이리라고 예상되는 이온은 ? (2점)

답:  $B^+$  , 모두 짝진 전자 (paired electrons)