

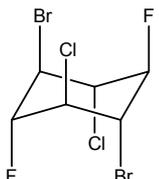
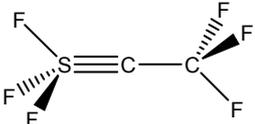
2006년도 교육대학원 무기화학 및 실험 중간고사

(2006년 5월 10일)

(Group Theory, Molecular Orbitals)

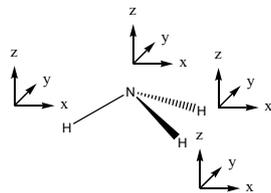
이름 _____

1. 다음 분자의 점군 (point group)은?

분자	점군
(a) ethane (staggered conformation)	
(b) ethane (eclipsed conformation)	
(c) chloroethane (staggered)	
(d) 1,2-dichloroethane (staggered anti conformation)	
(e) 	
(e) F_3SCCF_3 with $S \equiv C$ bond 	

2. NH_3 는 C_{3v} 점군에 속한다.

(a) NH_3 의 각 원자에 대한 x,y,z 축에 대한 total representation은?



C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ	12		

(b) Γ 를 irreducible representation들의 합으로 표현하라.

$\Gamma =$

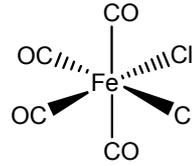
(c) (b)의 각 irreducible representation들을 translational, rotational, vibrational mode들로 분류하라.

운동 mode	irreducible representations
translational	
rotational	
vibrational	

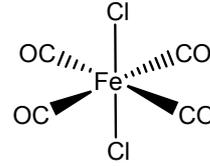
(d) (c)의 vibrational mode들 중 IR-active 한 mode는?

3. 다음 분자들에서 IR-active한 C-O stretching vibration mode의 수는? (풀이과정 적을 것)

(a)



(b)

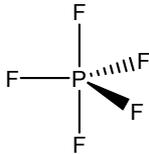


(a)	개
(b)	개

4. 다음은 d-오비탈들끼리 만나서 형성하는 분자오비탈들이다. 어떠한 d-오비탈이 만나서 형성하는 오비탈인가? 또 각 분자오비탈의 이름을 g와 u를 포함하여 표시하라.

d-오비탈	분자오비탈	오비탈 이름
d_{z^2} 와 d_{z^2}		σ_u^*
		
		
		
		
		

5. PF₅에서 중심원자에 형성되는 hybrid orbital에는 P의 어느 atomic orbital 들이 참여하여 어떠한 hybrid orbital 을 만드는지 결정하여라. (풀이과정 적을 것)



참여하는 오비탈:

형성되는 hybrid orbital:

7. H₃⁺ 이온은 실험적으로 관측된 바 있다. 그러나 그 구조에 대하여는 아직 논란이 있다. H₃⁺ 정삼각형 구조를 한다고 가정하였을 때 각 수소의 1s 오비탈 세 개로부터 형성되는 molecular orbital의 형태와 에너지 준위도를 그려 보도록 하자.

(a) point group은?

(b) 세 개의 오비탈에 대한 total representation은?

(c) (b)의 total representation을 irreducible representation의 합으로 표시하면?

$\Gamma =$

(d) 주어진 Symmetry adapted orbitals 그림을 보고 H₃⁺ 이온의 MO를 그려라.

(d) MO들의 energy 준위도를 그려라.

Symmetry-Adapted Orbitals

(e) H₃⁺ 이온의 전자 배치를 써라.

참고자료

Character Tables

C _{3v} (3m)	E	2C ₃	3σ _v	h=6	
A ₁	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	R _z	
E	2	-1	0	(x, y)(R _x , R _y)	(x ² -y ² , xy)(zx, yz)

C _{4v} (4mm)	E	2C ₄	C ₂	2σ _v	2σ _d	h=8	
A ₁	1	1	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A ₂	1	1	1	-1	-1	R _z	
B ₁	1	-1	1	1	-1		x ² -y ²
B ₂	1	-1	1	-1	1		xy
E	2	0	-2	0	0	(x, y)(R _x , R _y)	(zx, yz)

C _{2v} (2mm)	E	C ₂	σ _{v(xz)}	σ _{v(yz)}	h=4	
A ₁	1	1	1	1	z	x ² , y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	-1	R _z	
B ₁	1	-1	1	-1	x	
B ₂	1	-1	-1	1	y	

C _{6v} (6mm)	E	2C ₆	2C ₃	C ₂	3σ _v	3σ _d	h=12	
A ₁	1	1	1	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A ₂	1	1	1	-1	-1	-1	R _z	
B ₁	1	-1	1	1	-1	-1		
B ₂	1	-1	1	-1	1	1		
E ₁	2	1	-1	-2	0	0	(x, y)(R _x , R _y)	(zx, yz)
E ₂	2	-1	1	2	0	0		(x ² -y ² , xy)

D _{3h} (6m2)	E	2C ₃	3C ₂	σ _h	2S ₆	3σ _v	h=12	
A ₁ '	1	1	1	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A ₂ '	1	1	-1	1	1	-1	R _z	
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y)	(x ² -y ² , xy)
A ₁ ''	1	1	1	-1	-1	-1		
A ₂ ''	1	1	-1	-1	-1	1	z	
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R _x , R _y)	(zx, yz)

D _{6h} (6/mmm)	E	2C ₆	C ₃	2C ₂	2C ₂ '	i	2S ₆	σ _h	2σ _v	2σ _v '	h=24	
A _{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A _{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	R _z	
E _{1g}	2	1	1	0	0	2	0	2	0	0	(x, y)	x ² -y ²
E _{2g}	2	-1	1	0	0	2	0	-2	0	0	(R _x , R _y)	xy
A _{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A _{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
E _{1u}	2	1	1	0	0	-2	0	-2	0	0	(x, y)	
E _{2u}	2	-1	1	0	0	-2	0	2	0	0	(R _x , R _y)	(zx, yz)

D _{3h}	E	2C ₃	2C ₂ '	3C ₂	σ _h	2S ₆	2S ₆ '	3σ _v	h=24, s=72	
A ₁	1	1	1	1	1	1	1	1	z	x ² +y ² , z ²
A ₂	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	R _z	
E ₁	2	2 cos α	2 cos 2α	0	2	2 cos α	2 cos 2α	0	(x, y)	
E ₂	2	2 cos 2α	2 cos α	0	2	2 cos 2α	2 cos α	0		(x ² -y ² , xy)
A ₁ '	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
A ₂ '	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	z	
E ₁ '	2	2 cos α	2 cos 2α	0	-2	-2 cos α	-2 cos 2α	0	(R _x , R _y)	(zx, yz)
E ₂ '	2	2 cos 2α	2 cos α	0	-2	-2 cos 2α	-2 cos α	0		

