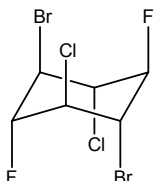
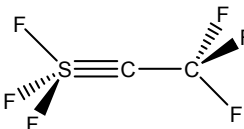


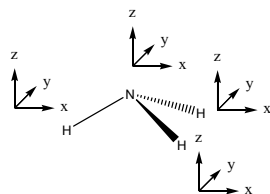
이름 _____

1. 다음 분자의 점군 (point group)은?

분자	점군
(a) ethane (staggered conformation)	D_{3d}
(b) ethane (eclipsed conformation)	D_{3h}
(c) chloroethane (staggered conformation)	C_s
(d) 1,2-dichloroethane (staggered anti conformation)	C_{2h}
(e) 	C_i
(e) F_3SCCF_3 with $S \equiv C$ bond 	C_{3v}

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	0	2

(b) Γ 를 irreducible representation의 합으로 표현하라.

$$\Gamma = 3A_1 + A_2 + 4E$$

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

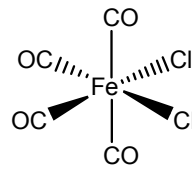
운동 mode	irreducible representations
translational	$A_1 + E$
rotational	$A_2 + E$
vibrational	$2A_1 + 2E$

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

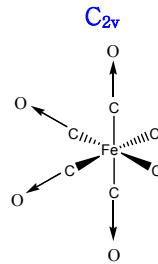
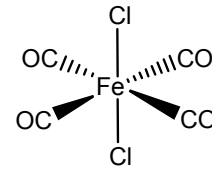
$$\text{all } (2A_1 + 2E)$$

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

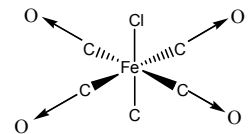
(a)



(b)



D_{4h}



4개의 CO stretching을 화살표로 표시하면 CO stretching에 대한 total representation은 $cis-Fe(CO)_4Cl_2$ 에 대하여

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'
Γ	4	0	2	2

이므로

$\Gamma = 2A_1 + B_1 + B_2$ 이다. Character table로부터 4개의 vibrational 모두 IR-active 하다.

$cis-Fe(CO)_4Cl_2$ 에 대하여

D_{4h}	E	$2C_4$	$2C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ	4	0	0	2	0	0	0	4	2	0

따라서

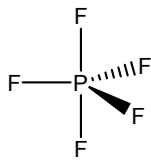
$\Gamma = A_{1g} + B_{1g} + E_u$ 이다. Character table로부터 IR-active한 mode는 E_u . 따라서 2개.

(a)	4	개
(b)	2	개

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

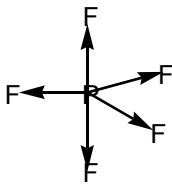
d-오비탈	분자오비탈	오비탈 이름
d_{z^2} 와 d_{z^2}		σ_u^*
d_{z^2} 와 d_{z^2}		σ_g
d_{xz} 와 d_{xz} (또는 d_{yz} 와 d_{yz})		π_g^*
d_{xz} 와 d_{xz} (또는 d_{yz} 와 d_{yz})		π_u
d_{xy} 와 d_{xy} (또는 $d_{x^2-y^2}$ 와 $d_{x^2-y^2}$)		δ_u^*
d_{xy} 와 d_{xy} (또는 $d_{x^2-y^2}$ 와 $d_{x^2-y^2}$)		δ_g

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



Point group: D_{3h}

P의 기저상태 전자 배치: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$



hybride orbital 들을 위의 그림과 같이 화살표로 표시하면 5개의 hybride orbital들에 대한 total representation은

D _{3h}	E	2C ₃	3C ₂	σ_h	2S ₃	3 σ_v
Γ	5	2	1	3	0	3

$$\Gamma = 2A_1' + E' + A_2''$$

따라서 A₁' symmetry를 가지는 오비탈 2개, E' symmetry를 가지는 오비탈 한 쌍 그리고 A₂'' symmetry를 가지는 오비탈 하나가 참여하여 hybrid orbital 형성.

Character table에서

A₁' --> s (3s), d_{z²} (3d_{z²})

E' --> 2개의 p (3p_x, 3p_y) 또는 2개의 d (3d_{x²-y²}, 3d_{xy}) 그런데 d 오비탈 들은 에너지 상태가 높으므로

hybrid orbital 형성에 미참여 따라서 3p_x, 3p_y A₂'' --> p_z (3p_z)

즉, 참여하는 오비탈은 3s, 3p_x, 3p_y, 3p_z, 3d_{z²} 형성되는 hybrid orbital은 sp³d

참여하는 오비탈: 3s, 3p _x , 3p _y , 3p _z , 3d _{z²}
형성되는 hybrid orbital: sp ³ d

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? D_{3h}

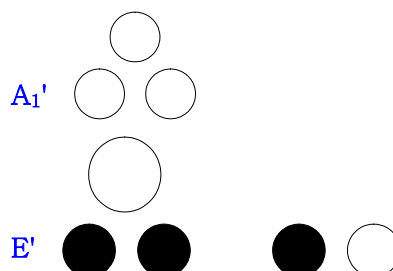
(b) 세 개의 오비탈에 대한 total representation은?

D _{3h}	E	2C ₃	3C ₂	σ_h	2S ₃	3 σ_v
Γ	3	0	1	3	0	1

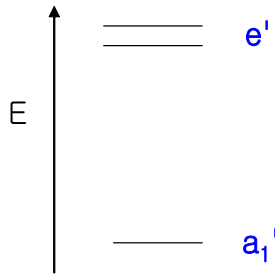
(c) (b)의 total representation을 irreducible representation의 합으로 표시하면?

$$\Gamma = A_1' + E'$$

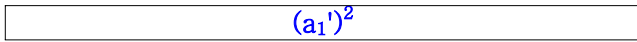
(d) 주어진 Symmetry adated orbitals 그림을 보고 H₃⁺ 이온의 MO를 그려라.



(d) MO들의 energy 준위도를 그려라.



(e) H_3^+ 이온의 전자 배치를 써라.



참고자료

Character Tables

C_{3v} (3m)	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	$h=6$
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	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$h=8$
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	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	$h=4$
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, R_x
B_2	1	-1	-1	1	y, R_y

C_{6v} (6mm)	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	$h=12$
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	x^2-y^2
B_2	1	-1	1	-1	-1	1	xy
E	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	$2S_6$	$3\sigma_v$	$h=12$
A_1'	1	1	1	1	1	1	z^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	z
A_2''	1	1	-1	-1	-1	-1	(R_x, R_y)
E''	2	-1	0	-2	1	0	(zx, yz)

D_{6h} (4/mmm)	E	$2C_6$	C_3	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_6$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$h=16$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	x^2+y^2, z^2
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	R_z
E_g	2	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	x^2-y^2
B_{1g}	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	-1	1	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	$(R_x, R_y) (zx, yz)$
E_u	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	z
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	(R_x, R_y)
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	(zx, yz)
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	x
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	y
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0	(x, y)

D_{2h}	E	$2C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_v'$	$2\sigma_v''$	$h=8$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	x^2+y^2, z^2
A_g'	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	R_z
E_g	2	$2\cos\alpha$	$2\cos 2\alpha$	0	2	$2\cos\alpha$	$2\cos 2\alpha$	0	(x, y)
E_g'	2	$2\cos 2\alpha$	$2\cos\alpha$	0	-2	$-2\cos\alpha$	$-2\cos 2\alpha$	0	(x^2-y^2, xy)
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	z
A_u'	1	1	1	1	1	1	1	1	(R_x, R_y)
E_u	2	$2\cos\alpha$	$2\cos 2\alpha$	0	-2	$-2\cos\alpha$	$-2\cos 2\alpha$	0	(zx, yz)
E_u'	2	$2\cos 2\alpha$	$2\cos\alpha$	0	2	$2\cos\alpha$	$2\cos 2\alpha$	0	(x, y)

Symmetry-Adapted Orbitals

