

대학원 Group Theory Quiz

1. 다음의 point group은?

- (a) azide ion (N_3^-) (b) cyclohexane (boat form) (c) cyclohexane (chair form) (d) $[\text{NiCl}_4]^-$

2. 다음의 point group을 갖는 분자또는 이온의 예를 하나씩 들고 symmetry element들을 그려보아라.

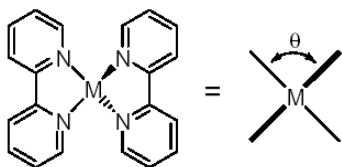
- (a) D_{3h} (b) C_{2v} (d) C_3

3. 다음 combination과 같은 operation은?

- (b) $S_3 \times S_3$ (b) $S_3 \times \sigma_h$ (c) $S_3 \times \sigma_v$ (d) $\sigma_v \times S_3$

4. 다음의 point group은?

- (a) $\theta = 90^\circ$ (b) $\theta = 70^\circ$



5. *cis*- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4]^{3+}$ 와 *trans*- $[\text{Co}(\text{NH}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4]^{3+}$ 에서

- (a) Co(III)의 s, p_x , p_y , p_z , $d_{x^2-y^2}$, d_{z^2} , d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} orbital 들의 symmetry type은 (수소무시)?
(b) 왜 어떤 orbital은 g , 어떤 orbital은 u 아래 첨자를 가지고 있는지 설명하여라.
(c) degenerate되어 있는 orbital들은?

6. 기체 상태의 Benzene의 vibrational spectroscopy 실험을 하면 ring-breathing mode가 992cm^{-1} 정도의 진동 에너지를

가지고 있음을 알 수 있다. 다음은

ring-breathing mode를 그림으로 나타낸 것이다.

- (a) Benzene 의 point group은?
(b) ring-breathing mode에 대한 symmetry type을 결정하여라.
(c) 위의 vibrational spectroscopy는 Raman 이었을까? IR 이었을까?

7. 혼성오비탈(hybrid)의 형성을 Group Theory로 예측할 수 있다. 다음은 BCl_3 에서 Boron(B) 원자에 hybrid가 형성되는 과정이다.

- (a) BCl_3 의 point group을 써라.
(b) 옆의 그림은 trigonal planar bond를 나타내는 세 벡타의 세트 (a set of three vectors)이다.

위 벡타 세트는 BCl_3 의 point group의 reducible representation를 만드는 basis로 사용될 수 있다. 위 벡타 세트에 대한 BCl_3 의 point group의 symmetry operation을 matrix 형태로 적어라.

- (c) 각 operation에 대한 character를 적어라.
(e) (c)의 character 값들을 갖는 reducible representation을 Γ_1 이라고 하자. Γ_1 은 어떠한 irreducible representation (symmetry type) 들의 합으로 이루어져 있는가?
(f) (e)에서 얻은 각 irreducible representation에 속하는 Boron의 원자오비탈들을 적어라.
(g) 따라서 reducible representation (Γ_1) 속하는 Boron의 원자오비탈들은 어떤 것들일까?
(h) (g)로부터 어떠한 hybrid가 형성되었을까 예측해 보아라.