대학원 Group Theory Quiz 190

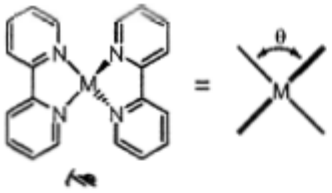
quiz1

1. 다음의 point group은? (20)
(a) azide ion (N_3^-) (b) cyclohexane (boat form) (c) cyclohexane (chair form) (d) $[NiCl4]^-$

2. 다음의 point group을 갖는 분자또는 이온의 예를 하나씩 들고 symmetry element들을 그려보아라. (30)
(a) D_{3h} (b) C_{2v} (d) C_3

3. 다음 combination과 같은 operation은? (20)
(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? (20)
(a) $\theta = 90°$ (b) $\theta = 70°$

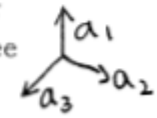


5. *cis*-$[Co(NH_3)_2(H_2O)_4]^{3+}$와 *trans*-$[Co(NH_3)_2(H_2O)_4]^{3+}$에서 (40)
(a) Co(III)의 s, p_x, p_y, p_z, d_{x2-y2}, d_{z2}, d_{xy}, d_{xz}, d_{yz} orbital 들의 symmetry type은 (수소무시)?
(b) 왜 어떤 orbital은 g , 어떤 orbital은 u 아래 첨자를 가지고 있는지 설명하여라.
(c) degenerate되어 있는 orbital들은?

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. (20)

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

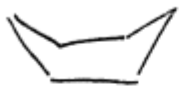
7. 혼성오비탈(hybrid)의 형성을 Group Theory로 예측할 수 있다. 다음은 BCl_3에서 Boron(B) 원자에 hybrid가 형성되는 과정이다. (40)
(a) BCl_3의 point group을 써라.
(b) 옆의 그림은 trigonal planar bond를 나타내는 세 벡타의 세트 (a set of three vectors)이다.



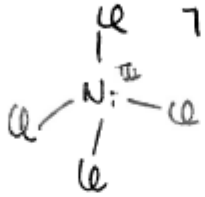
위 벡타 세트는 BCl_3의 point group의 reducible representation를 만드는 basis로 사용될 수 있다. 위 벡타 세트에 대한 BCl_3의 point group의 symmetry operation을 matrix 형태로 적어라.
(c) 각 operation에 대한 character를 적어라.
(e) (c)의 character 값들을 갖는 reducible representation을 Γ_1 이라고 하자. Γ_1은 어떠한 irreducible representation (symmetry type) 들의 합으로 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.

제01.

1. (a) $N \equiv N - N^{-}$ ($D_{\infty h}$)

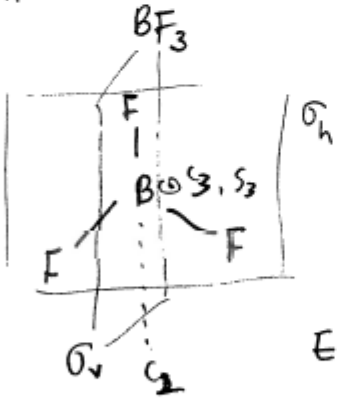
(b)  (C_{2v})

(c)  (D_{3d})

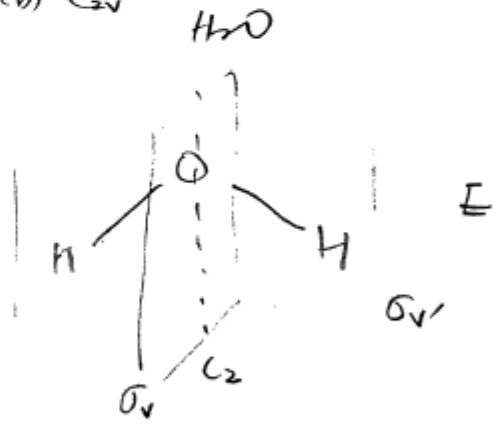
(d) $[N:Cl_4]^-$  (T_d)

but $[N:(CN)_4]^-$ → Sq. pl D_{4h}

2. (a) D_{3h}

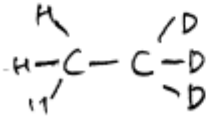
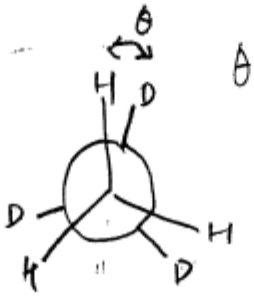


(b) C_{2v}



(c) C_3

$H_3C{-}CD_3$ with same dihedral angle

C_3 —  —  $\theta \neq 60°$

3.

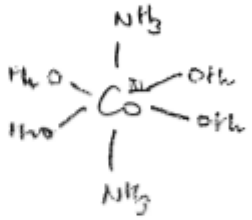
(a) $S_3 \times S_3 = C_3^2$ (b) $S_3 \times \sigma_h = C_3$

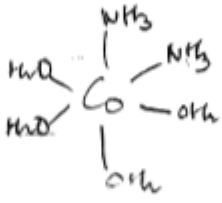
(c) $S_3 \times \sigma_v = C_2$ (d) $\sigma_v \times S_3 = C_2$

4. (a) D_{2d} (b) D_2

5.

trans - $[Co(NH_3)_2(H_2O)_4]^{3+}$ cis - $[Co(NH_3)_2(H_2O)_4]^{3+}$





D_{4h} C_{2v}

(a)

S (A_{1g})	S (A_1)
R_x, R_y (E_u), R_z (A_{2u})	R_x (B_1), R_y (B_2), R_z (A_2)
d_{z^2} (A_{1g}), $d_{x^2-y^2}$ (B_{1g})	d_{z^2} (A_1), $d_{x^2-y^2}$ (A_1)
d_{xy} (B_{2g}),	d_{xy} (A_2), d_{yz} (B_2), d_{xz} (B_1)
d_{xz}, d_{yz} (E_g)	

(b)

D_{4h} 에서의 inversion operation 에 대해 symmetric 하면 g (우상이 같은), antisymmetric (우상이 반대인) 임.

↓ ↓

s, d orbitals p-orbitals

(c)

D_{4h} : R_x, R_y & d_{xz}, d_{yz}

C_{2v} : 모두 다.

6.

(a) D_{6h}

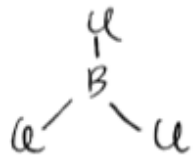
(b)

D_{6h}	E	$2C_6$	$3C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	i	$2S_3$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
Γ	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

$\therefore \Gamma = A_1$

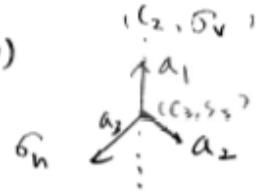
(c) Raman (Raman active, IR inactive)

7 (a)



D_{3h}

(b)



$$E\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$$

$$C_3\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_3\\a_1\\a_2\end{pmatrix}$$

$$C_2\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\\a_3\\a_2\end{pmatrix}$$

$$\sigma_h\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$$

$$S_3\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_3\\a_1\\a_2\end{pmatrix}$$

$$\sigma_v\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_1\\a_3\\a_2\end{pmatrix}$$

(c)

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ_1	3	0	1	3	0	1

(e) $\Gamma_1 = A_1' + E'$

(f) A_1' : s , E'' : p_x, p_y

(g) 2s, $2p_x$, $2p_y$

(h) sp^2