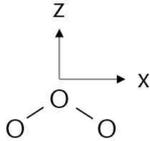


학번 _____ 이름 _____

- 시험시간 7:00 - 9:20pM
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 휴대전화의 전원은 무조건 끌 것. 감독관의 눈에 전화기가 보이면 이유 여하를 막론하고 부정행위로 간주 함.
- 답은 주어진 네모 안에 적을 것. 빈 공간에는 풀이 과정을 적을 것.
- 문항수: 5, 시험지: 4 쪽, 만점: 354점

1. 공기 중의 O₃(ozone)은 산소(O₂)가 자외선과 반응하거나 번개와 만나 생성된다. O₃는 옅은 파란색을 띠며 톡 쏘는, 독특한 냄새를 가지고 있다. O₃에 대한 다음의 질문에 답하시오.



(a) (10점) O₃는 위의 그림과 같이 굽은형의 구조를 하고 있다. O₃의 Lewis 구조를 그리고, O₃가 굽은형인 이유를 쓰시오.

Lewis 구조(공명 구조가 있으면, 모두 그릴 것)	
구조에 대한 이유	

(b) (5점) O₃의 점군(point group)은 무엇인가?

--- O₃의 진동 운동 ---

(c) (5점) O₃가 가지고 운동의 총 자유도(total degree of freedom)는 얼마인가?

다음 표는 O₃가 속한 점군의 지표표(character table)이다.

	E	C ₂	σ _v (xz)	σ _{v'} (yz)		
A ₁	1	1	1	1	z	x ² , y ² , z ²
A ₂	1	1	-1	-1	R _z	xy
B ₁	1	-1	1	-1	x, R _y	xz
B ₂	1	-1	-1	1	y, R _x	yz

(d) (5점) O₃에 있는 각 원자의 x, y, z 축을 분석하여, O₃가 가지고 있는 운동의 총 자유도에 대한 가약표현(reducible representation, Γ)을 구하시오.

	E	C ₂	σ _v (xz)	σ _{v'} (yz)
Γ	9	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

(e) (10점) (d)의 가약표현(Γ)을 기약표현(irreducible representation)의 합으로 나타내시오.(Little orthogonality theorem을 이용하여 구하는 과정을 보일 것)

답 Γ =

(f) (15점) O₃의 병진운동(translational motion), 회전운동(rotational motion), 진동운동(vibrational motion)에 대한 각각의 가약표현은 어떤 기약표현의 합으로 나타낼 수 있는가?

Γ _{tran}	
Γ _{rot}	
Γ _{vib}	

(g) (15점) (f)에서 구한 O₃의 각 진동모드에 대해 symmetry type, IR-active, Raman active 한지 밝히고, 진동 운동을 그림으로 그리시오.(행의 수는 필요 이상으로 주어져 있다.) [1=symmetry type, 2 = IR-, Raman-active (IR, Raman, both 중 선택)]

1	2	진동 모드의 그림

--- O₃의 분자오비탈(MO, Molecular orbital) ---

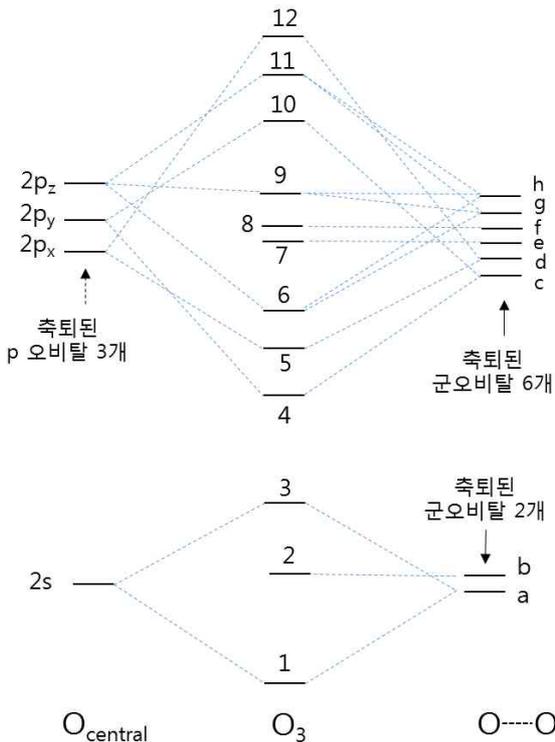
(h) (20점) 다음 그림은 O₃의 바깥에 있는 두 O 원자의 원자가오비탈 (valence orbital) 중 2s 오비탈 두 개, 2p_x 두 개, 2p_y 두 개, 2p_z 두 개로부터 유도되는 군오비탈의 모양이다. 비어있는 칸에 군오비탈의 모양을 각각 그리고, symmetry type을 밝히시오

2s + 2s	
A₁	
2p _x + 2p _x	
2p _y + 2p _y	
2p _z + 2p _z	

(i) (10점) 앞의 지표표를 참고하여 O₃의 가운데 있는 O 원자의 원자가오비탈(valence orbital)의 symmetry type을 결정하시오.

2s	2p _x	2p _y	2p _z

아래의 그림은 O₃의 분자오비탈 에너지 준위도를 나타낸 것이다.(아래 준위도는 엄밀한 의미에서 정확하지는 않으나 문제 출제를 위하여 단순화한 MO energy level diagram이다.)



(j) (44점) 다음 표는 O₃의 각 MO의 모양, bonding, nonbonding, antibonding 성격, σ, π 성격, 오비탈 이름이다. 빈칸을 채우시오.

[1 = bonding, nonbonding, antibonding 오비탈? 셋 중 택 1]

[2 = σ, π 성격? 둘 중 택 1]

[3 = 오비탈 이름]

MO	모양	1	2	3
12				
11		antibonding	σ	
10				
9		nonbonding (nearly)	σ	
8		nonbonding		
7				
6		bonding	π	
5		bonding		
4				
3			σ	2a₁
2		nonbonding		1b₁
1				1a₁

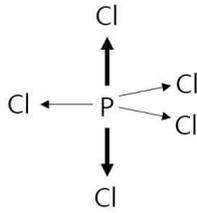
(k) (10점) 위의 MO에서 11, 9, 6 MO는 다음 세 오비탈의 linear combination으로 만들어 진다. ① 가운데 있는 O 원자의 2p_z 오비탈, ② 양쪽의 두 O 원자에 있는 2p_x 오비탈 두 개로부터 유도되는 두 군오비탈 중 하나, ③ 양쪽의 두 O 원자에 있는 2p_z 오비탈 두 개로부터 유도되는 두 군오비탈 중 하나.

위 표에 주어진 정보를 이용하여 MO 6과 MO 11의 모양을 그리시오.

MO	6	11
모양		

(l) (10점) O₃는 개의 원자가전자를 가지고 있으므로 MO 에너지 준위도에서 HOMO는 번 MO 이다.

2. PCl_5 는 삼각쌍뿔의 구조를 한다. PCl_5 에서 축방향의 P-Cl 결합길이는 219 pm 이고, 적도방향의 P-Cl 결합길이는 204 pm로 축방향이 더 길다. 이를 원자오비탈과 군론 그리고 원자가결합이론(VBT)을 이용하여 설명할 수 있다. 아래 그림은 PCl_5 이 속한 점군의 지표표와 PCl_5 에 있는 5개의 σ -결합을 화살표로 나타낸 것이다.



	E	2C ₃	3C ₂	σ_h	2S ₃	3 σ_v		
A ₁ '	1	1	1	1	1	1	R _z	$x^2 + y^2, z^2$
A ₂ '	1	1	-1	1	1	-1		(x, y)
E'	2	-1	0	2	-1	0	z	(xz, yz)
A ₁ ''	1	1	1	-1	-1	-1		
A ₂ ''	1	1	-1	-1	-1	1	(R _x , R _y)	(xz, yz)
E''	2	-1	0	-2	1	0		

(a) (5점) PCl_5 는 어느 점군에 속하는가?

(b) (5점) 위 점군에서 화살표 다섯 개에 대한 가약표현(Γ)을 구하십시오.

	E	2C ₃	3C ₂	σ_h	2S ₃	3 σ_v
Γ	5	<input type="text"/>	1	<input type="text"/>	0	<input type="text"/>

(c) (5점) (b)의 가약표현(Γ)을 기약표현의 합으로 나타내시오.(답만 쓸 것)

$\Gamma =$

(d) (5점) 지표표와 (c)의 답을 참고로 하여 PCl_5 에 있는 5개의 σ -결합을 형성하기 위해, P에 형성되는 혼성오비탈(hybrid)을 만드는 데 참여하는 오비탈을 쓰시오.

(e) (10점) 위 그림에서 축방향에 있는 σ -결합을 나타내는 화살표 2개(굵은 화살표)에 대한 가약표현(Γ_{ax})과 적도방향에 있는 σ -결합을 나타내는 화살표 3개(가는 화살표)에 대한 가약표현(Γ_{eq})을 구하십시오.

	E	2C ₃	3C ₂	σ_h	2S ₃	3 σ_v
Γ_{ax}	2	<input type="text"/>				
Γ_{eq}	3	<input type="text"/>				

(f) (10점) (e)의 가약표현(Γ_{ax}, Γ_{eq})을 각각 기약표현의 합으로 나타내시오.(답만 쓸 것)

$\Gamma_{ax} =$

$\Gamma_{eq} =$

(g) (10점) 지표표와 (f)의 답을 참고로 하여 PCl_5 의 축방향에 있는 2개의 σ -결합을 형성하기 위해, P에 형성되는 혼성오비탈(hybrid)을 만드는 데 참여하는 오비탈과 적도방향에 있는 3개의 σ -결합을 형성하기 위해, P에 형성되는 혼성오비탈(hybrid)을 만드는 데 참여하는 오비탈을 각각 쓰시오.

축방향	적도방향
<input type="text"/>	<input type="text"/>

(h) (15점) 축방향의 P-Cl 결합길이가 적도방향보다 더 긴 이유를 설명하십시오.

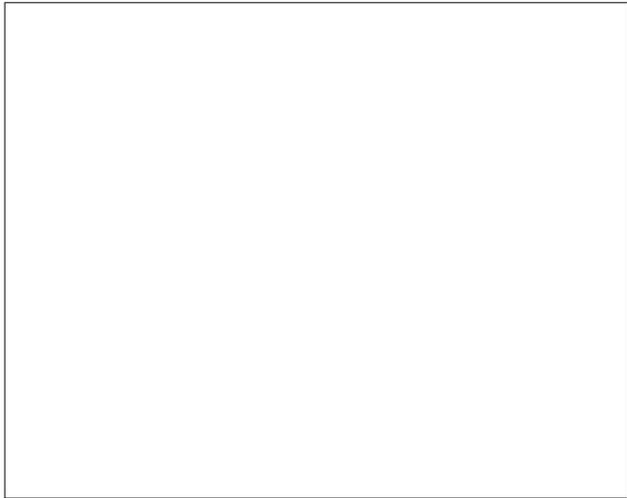
3. (65점) 다음의 빈칸을 채우시오. (만일 입체이성질현상(stereoisomerism)이 일어나는 화합물이면 그 부분을 정확히 이름에 표시할 것) (착물이 음이온이거나 양이온인 경우, 구조에 전하량을 정확하게 표시할 것) (점군을 결정할 때 킬레이트가 있으면 킬레이트링은 하나의 평면으로 놓고 생각할 것)

	이름 (Stock system) (nomenclature)	구조	점군
(a)			
(b)	[Cr(NH ₃) ₃ Cl ₃] 이름을 쓰고 구조를 그릴 것		C _{2v}
(c)	[Cr(NH ₃) ₃ Cl ₃] 이름을 쓰고 구조를 그릴 것		C _{3v}
(d)			
(e)	β - Δ -tris(ethylenetetraamine)-difluorocobalt(III)		
(f)			
(g)	[Pt(NH ₃) ₂ BrCl]		C _s

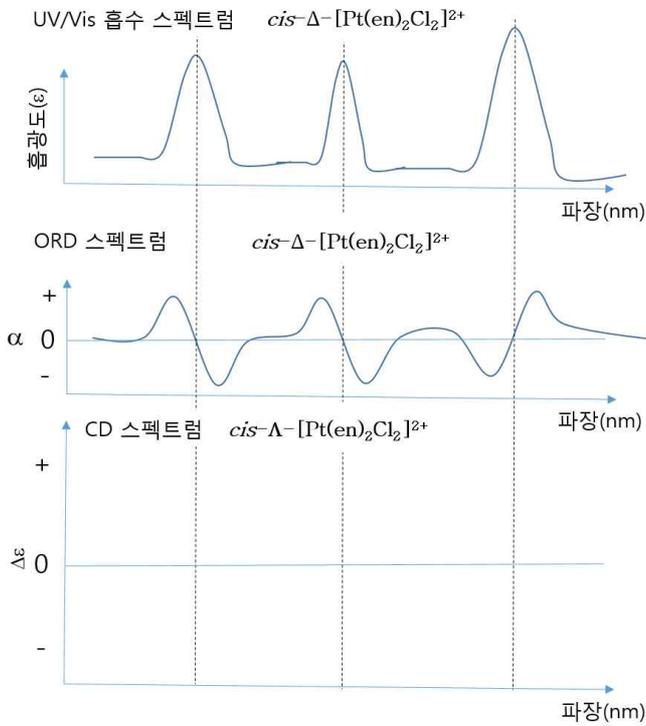
4. (15점) $cis-[Pt(en)_2Cl_2]^{2+}$ 에는 키레이드링의 배열로 보았을 때 두 개의 광학이성질체가 있다. (en = N \setminus N 으로 그릴 것)

(a) 다음 빈칸을 채우시오.

이름 (Stock system)	$cis-\Delta-$	$cis-\Lambda-$
구조 (그림)		



(b) (15점) 위의 $cis-\Delta-[Pt(en)_2Cl_2]^{2+}$ 에 대하여 UV/Vis 흡수 스펙트럼과 ORD(Optical rotatory dispersion)을 얻었더니 아래 그림과 같았다고 가정하자. $cis-\Lambda-[Pt(en)_2Cl_2]^{2+}$ 의 예상되는 CD(Circular dichroism) 스펙트럼을 아래에 대략적으로 그리시오.



(b) (10점) **A**의 주장은 결국 올바른 것으로 증명되었지만 과학적 사유의 관점에서 보았을 때 **A**의 주장은 오류를 가지고 있다. 그것은 무엇인지 간략히 서술하시오.



(c) (5점) **A**는 누구인가?

5. (a) (20점) **A**는 $[Co(NH_3)_4Cl_2]^+$ 에 대하여 연구하던 중 $[Co(NH_3)_4Cl_2]^+$ 의 두 가지 이성질체를 발견하였다. 이를 근거로 **A**는 $[Co(NH_3)_4Cl_2]^+$ 가 팔면체 배위구조를 한다고 주장하였다. **A**가 착물에 대하여 연구하던 시절에는 아직 착물의 구조에 대한 이해가 많이 부족했던 시절로 다른 6배위 구조도 제안되었다. 6각형 배위 구조와 팔면체 배위 구조를 비교하여 **A**가 팔면체 배위 구조를 주장하게 된 이유를 설명하시오.

