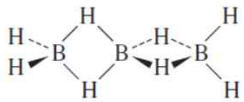
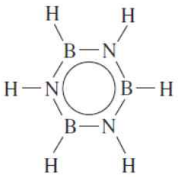
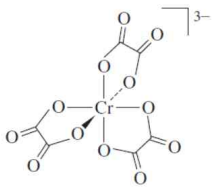
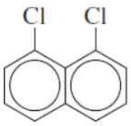
2015년도 무기화학2 중간고사 (2015년 10월 29일)

학번_____ 이름_____

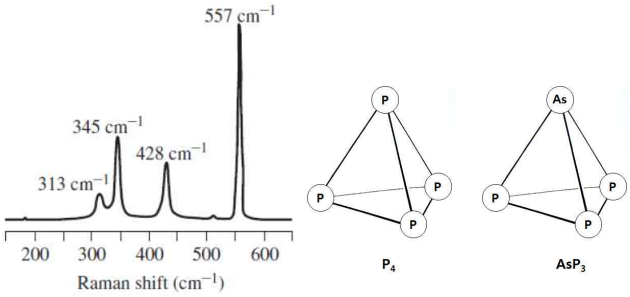
- 시험시간 10:30 - 12:30PM
- 학생들 사이의 계산기 교환은 허락하지 않음.
- 휴대전화의 전원은 무조건 끌 것. 감독관의 눈에 전화기가 보이면 이유 여하를 막론하고 부정행위로 간주 함.
- 답은 주어진 네모 안에 적을 것. 빈 공간에는 풀이 과정을 적을 것.
- 문항수: 8, 쪽수: 3, 만점: 252점

1. (30점) 다음의 구조에 대하여 점군을 결정하여라.

구조	점군
Wine glass	$C_{\infty v}$
Quadcopter drone	C_4
Quadcopter drone	C_{4v}
B_3H_8 	D_{2d}
Borazine (planar) 	D_{3h}
$[Cr(ox)_3]^{-3}$ 	D_3
1,8-dichloronaphthalene 	C_{2v}
propadiene $H_2C=C=CH_2$	D_{2d}
phosphorus pentafluoride PF_5	D_{3h}
methane CH_4	T_d

2. (10+ 10+ 10+ 10+ 5+ 10=55점) <그림1>은 P_4 또는 AsP_3 중 하나의 Raman 스펙트럼으로 4개의 peak를 가지고 있다. 어느 것의 Raman 스펙트럼인지 결정하고자 한다.

<그림1>

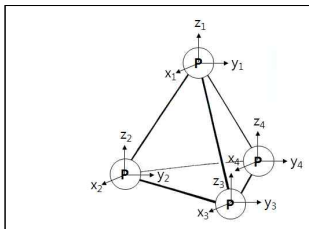


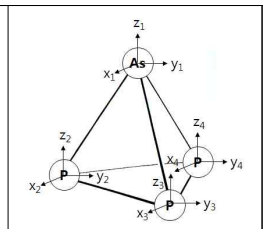
<참고: 지표표>

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2+y^2+z^2$
A_2	1	1	1	−1	−1		
E	2	−1	2	0	0		$(2z^2-x^2-y^2, x^2-y^2)$
T_1	3	0	−1	1	−1	(R_x, R_y, R_z)	
T_2	3	0	−1	−1	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
A_1	1	1	1	z	x^2+y^2, z^2
A_2	1	1	−1	R_z	
E	2	−1	0	$(x, y), (R_x, R_y)$	$(x^2-y^2, xy), (xz, yz)$

(a) 아래 그림을 참고하여 각 분자에 있는 12개의 축에 대한 가약표현(reducible representation, Γ)을 구하여라.





T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ	12	0	0	0	2	Γ	12	0	2

(b) 위의 가약표현을 기약표현(irreducible representation)의 합으로 나타내어라.(AsP_3에 대하여 구하는 과정도 보일 것)

P_4	AsP_3
	$A_1=(1/6)(12+6)=3$ $A_2=(1/6)(12-6)=1$ $E=(1/6)(24)=4$
$\Gamma = A_1 + E + T_1 + 2T_2$	$\Gamma = 3A_1 + A_2 + 4E$

(c) (b)에 있는 Γ에서 병진운동(translation)과 회전운동(rotation), 진동운동(vibration)에 대한 표현을 각각 기약표현의 합으로 나타내어라.

P_4	AsP_3
$\Gamma_{trans} = T_2$	$\Gamma_{trans} = A_1 + E$
$\Gamma_{rot} = T_1$	$\Gamma_{rot} = A_2 + E$
$\Gamma_{vib} = A_1 + E + T_2$	$\Gamma_{vib} = 2A_1 + 2E$

(d) (c)의 Γ_{vib}에서 Raman-active한 vibrational mode를 나타내는 표현을 기약표현의 합으로 나타내어라.

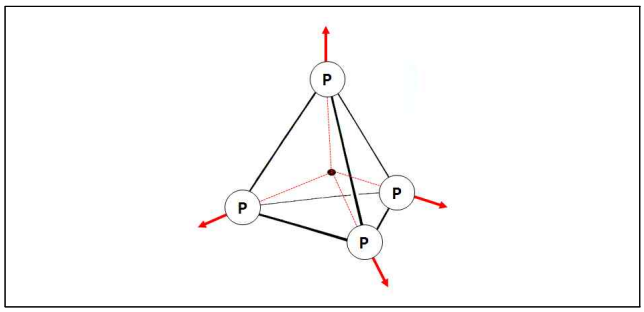
P_4	AsP_3
$\Gamma_{vib(Raman)} = A_1 + E + T_2$	$\Gamma_{vib(Raman)} = 2A_1 + 2E$

(참고: 어떤 분자에서 10개의 Raman-active한 진동 모드가 있고, 그 표현이 $\Gamma_{vib(Raman)} = A_{1g} + 2E_g + 2T_{2g}$ 일 경우 Raman 스펙트럼에서 5개의 peak가 보인다.)

(e) <그림 1>은 P_4 또는 AsP_3 중 어느 것의 Raman 스펙트럼인가?

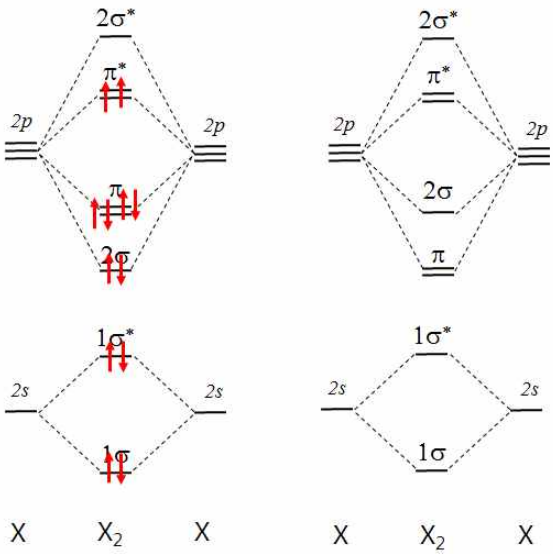
AsP_3

(f) (d)의 Raman-active한 진동 모드 중 P_4 분자에서 A_1 symmetry type의 진동 모드를 아래 그림에 화살표를 이용하여 나타내어라.(검은 점은 정사면체의 중심을 표시한 것이다.)

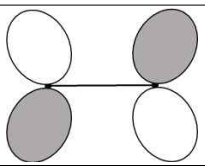


3. (5+15=20점) 아래 그림은 2주기 동핵 2원자 분자(homonuclear diatomic molecule)에서 분자오비탈(MO)의 에너지 준위도이다.

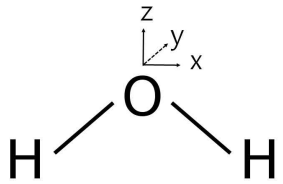
(a) O_2의 MO 에너지 준위도에 해당하는 그림에 O_2의 전자배치를 화살표로 표시하여라.



(b) O_2는 상자기성(paramagnetic) 분자이다. 상자기성을 보이게 하는 전자가 들어있는 MO에 대하여 다음을 답하라.(위 준위도를 바탕으로 답할 것)

MO의 이름	대칭성은 g(gerade), u(ungerade) ?	모양
π*	g	

4. (15+5+5+10+8+23+5=71점) H_2O의 화학결합에 대하여 알아보고자 한다.



(a) 원자가결합이론(Valence Bond Theory)에 따르면 O에 형성되는 혼성오비탈은 [sp^3] 이고, 이 혼성오비탈은 H_2O에 모두 [4] 개 있다. 또한 H_2O에는 σ-결합이 [(가) 2] 개, π-결합이 [0] 개, 고립전자쌍(lone pair)이 [(나) 2] 쌍 있다.

H_2O의 화학결합을 분자오비탈이론(Molecular Orbital Theory)으로 설명하고자 한다.

(b) H_2O의 점군은? [C_{2v}] (틀리면 아래는 모두 0점. 이 문항에 해당하는 점수를 지불하고 답을 구매할 수 있음)

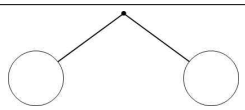
H_2O에서 2개 H 원자의 원자오비탈로부터 군오비탈(Group Orbital)을 건설하고자 한다.

(c) H의 1s 오비탈 2개에 대한 가약표현을 구하고, 가약표현을 기약표현의 합으로 나타내어라.

	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$		
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

	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$	기약표현의 합
$\Gamma_{2H(1s)}$	2	0	2	0	$A_1 + B_1$

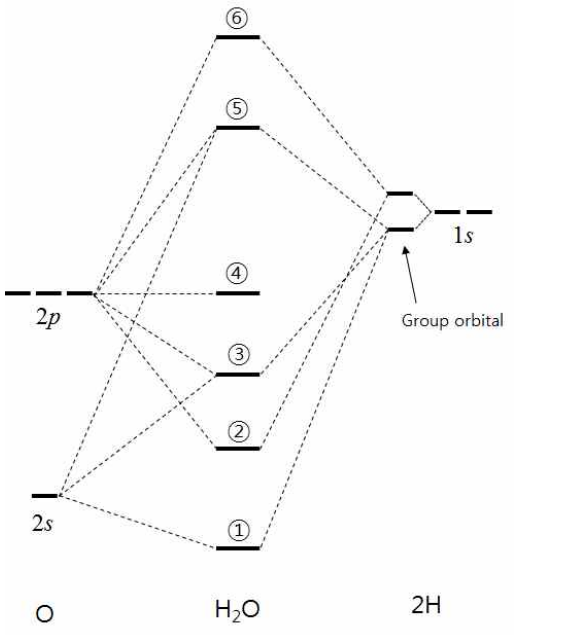
(d) (c)의 답을 참고하여 H의 1s 오비탈들로부터 만들어지는 군오비탈 2개의 symmetry type을 결정하고 그 모양을 그려라.

Symmetry type	모양
A_1	
B_1	

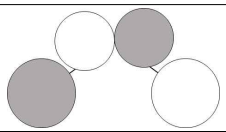
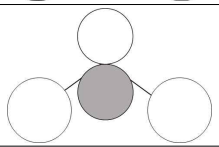
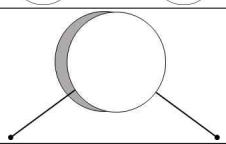
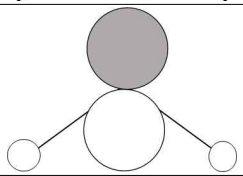
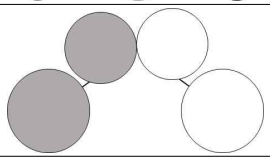
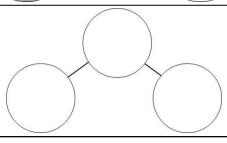
(e) O의 2s, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ 오비탈의 symmetry type을 결정하여라.

오비탈	Symmetry Type	오비탈	Symmetry Type
2s	A_1	$2p_x$	B_1
$2p_y$	B_2	$2p_z$	A_1

아래는 H_2O의 분자오비탈(Molecular Orbital, MO) 에너지 준위도이다.



(f) (d)와 (e)의 결과를 이용하여 위 에너지 준위도에 있는 MO의 이름을 쓰고 모양을 그리시오.

MO		모양
⑥	$2b_1$	
⑤	$4a_1$	
④	$1b_2$	
③	$3a_1$	
②	$1b_1$	
①	$2a_1$	

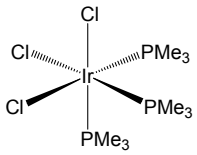
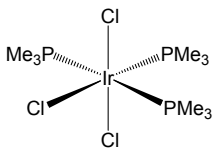
(g) 위의 에너지 준위도에서 σ-결합에 해당하는 오비탈과 고립전자쌍이 있는 오비탈의 번호를 있는 대로 모두 써라.(각각 (a)의 (가)와 (나)에 있는 수 만큼 써야함)

σ-결합	고립전자쌍
①, ②	③, ④

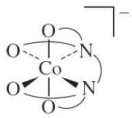
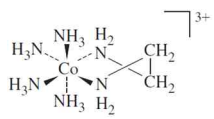
5. (20점) 다음 착화합물의 이름 또는 화학식을 써라.

화학식	이름
$[Cr(H_2O)_5Br]^{2+}$	pentaaquabromochromium(III) pentaaquabromochromium(2+) 펜타아쿠아브로모크로뮴(III)
$[Mn(CO)_6]ClO_4$	hexacarbonylmanganese(I) perchlorate
$[PtCl_2(H_2O)_2]^{2+}$	diaquadichloroplatinum(IV) diaquadichloroplatinum(2+) 다이아쿠아다클로로프라티넘(IV)
$[Mn(CN)_6]^{4-}$	hexacyanomaganate(II)

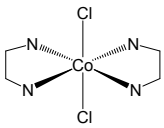
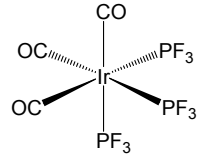
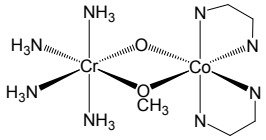
6. (16점) 4 배위의 square-planar 착화합인 $[IrCl(PMe_3)_3]$는 Cl_2와 반응하여 6 배위 착물인 $[IrCl_3(PMe_3)_3]$를 만든다. 이 때 만들어진 $[IrCl_3(PMe_3)_3]$은 2개의 이성질체(Isomer)를 가지고 있다. 각각의 이성질체에서 얻은 ^{31}P-NMR 스펙트럼을 분석하면, 하나는 1개의 ^{31}P peak, 다른 하나는 2개 가지고 있음을 알 수 있다. 각 이성질체의 구조를 그리고 명명하여라.(*A*-$[IrCl_3(PMe_3)_3]$ 형태로 명명할 것).

^{31}P-NMR peak의 개수	1개	2개
이름	*fac*-$[IrCl_3(PMe_3)_3]$	*mer*-$[IrCl_3(PMe_3)_3]$
구조		

7. (16점) 다음 키랄(chiral) 화합물의 절대 배열(absolute configuration; Δ, Λ, δ, λ)과 d-전자의 개수를 결정하여라.

	 Ligand = EDTA	
d-전자 개수	Co(III) => 6	Co(III) => 6
절대 배열	(기호 2개 이상 필요) ΔΔΔ	δ

8. (24점) 다음 화합물의 구조를 그리고 광학 활성이 있는지를 결정하여라.

trans-dichlorobis(ethylenediamine)cobalt(III)	
구조	광학활성(yes, no로 표시)
	no
fac-tricarbonyl-tris(trifluorophosphine)molybdenum(0)	
	no
tetraamminechromium(III)-μ-oxo-μ-methoxo-bis(ethylenediamine)cobalt(III)	
	yes