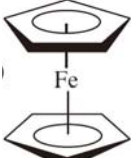
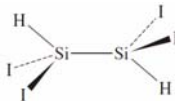
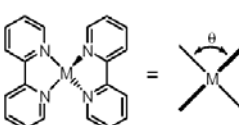
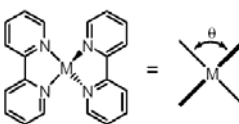
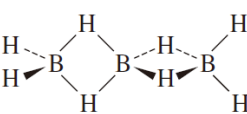
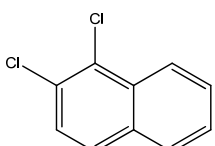
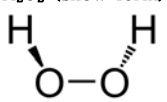
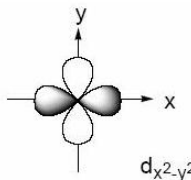


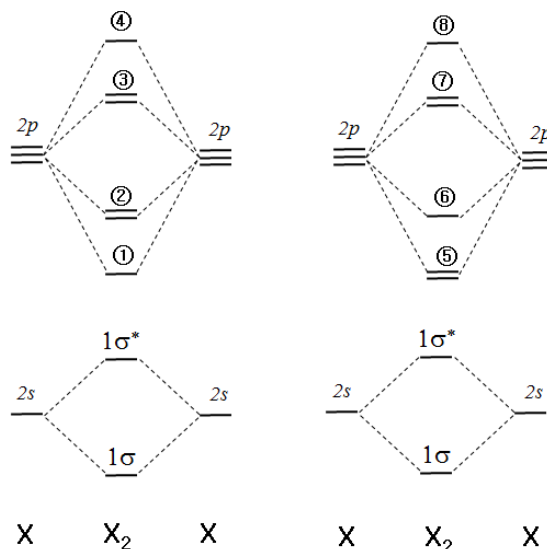
학번 _____ 이름 _____

- 시험시간 7:00 - 9:30PM
- 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. 빈 공간의 크기와 풀이 과정의 길이는 상관 관계가 없음.
- 문항수: 8, 쪽수: 4, 만점: 312점

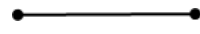
1. (30점) 다음의 구조에 대하여 점군을 결정하여라.

구조	점군
Ferrocene (staggered) 	
경복대학교 마크 	
1,1,2,2-tetraiodosilane 	
bis(bipy)M complex ($\theta = 90^\circ$) 	
bis(bipy)M complex ($\theta = 70^\circ$) 	
B_3H_8 	
1,2-dichloronaphthalene 	
H_2O_2 (skew form) 	
 $d_{x^2-y^2}$	
ammonia NH_3	

2. (16+ 15=31점) 아래 그림은 2주기 동핵 2원자 분자(homonuclear diatomic molecule)에서 분자오비탈(MO)의 에너지 준위도이다.



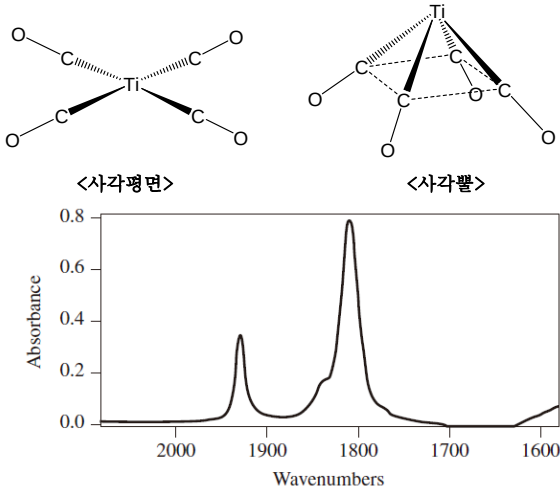
(a) N_2 , F_2 에서 HOMO(highest occupied molecular orbital)에 해당하는 MO의 번호, 이름, 대칭성을 쓰고 모양을 그려라.(축퇴되어 있을 경우 하나만 그릴 것)

분자	HOMO			
	번호	이름	대칭성은 g(gerade), u(ungerade) ?	모양
N_2				
F_2				

(b) C_2^{2-} , N_2^{2-} , O_2^{2-} 의 결합 차수, 자기성을 쓰고, 결합길이를 비교하라.

분자	결합차수	자기성 (상자기성, 반자기성?)
C_2^{2-}		
N_2^{2-}		
O_2^{2-}		
결합 길이 비교		< <

3. (5+10+10+5+5+20=55점) $[\text{Ti}(\text{CO})_6]^{2-}$ 와 Ph_3CCl 가 반응하면 $\text{Ti}(\text{CO})_4$ 가 생성된다. 생성된 $\text{Ti}(\text{CO})_4$ 의 구조는 사각평면, 사각뿔, 사면체 중 하나일 것으로 예상된다. 구조를 확인하기 위해 $\text{Ti}(\text{CO})_4$ 의 IR 스펙트럼을 얻고 C-O 신축진동(stretching vibration)을 살펴보니 아래와 같이 2개의 C-O 신축진동 peak가 관찰되었다.



<IR 스펙트럼>

<참고: 지표표>

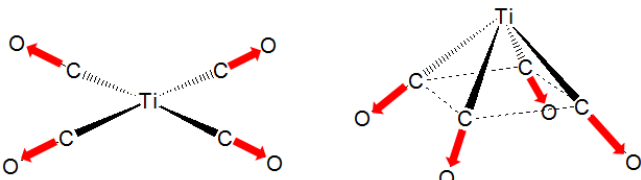
D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1		
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1		xy
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1		z
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1		
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0	(x, y)	

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
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	$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)

(a) 각 분자의 점군은? (이 문항이 틀리면 3번 문제는 무조건 0 점. 정답을 10점을 주고 구입할 수 있음)

사각평면 구조	
사각뿔 구조	

(b) 아래 그림은 각 분자에서 각각의 C-O 신축진동을 화살표로 표시한 것이다. 이를 참고하여 각 분자에 대응하는 대칭 조작표에 4개의 C-O 신축진동에 대한 가약표현(reducible representation, Γ)을 구하여라.



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

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_{CO}	4				

(c) 위의 가약표현을 기약표현(irreducible representation)의 합으로 나타내어라. (C_{4v} 대하여 little orthogonality theorem을 이용하여 구하는 과정도 보일 것.)

D_{4h}	$\Gamma = A_{1g} + B_{1g} + E_u$
C_{4v}	
	$\Gamma =$

(d) (c)에 있는 Γ_{CO} 에서 IR-active 한 C-O 신축진동의 대칭성(Symmetry type)은 각각 무엇인가?

D_{4h}	C_{4v}
$\Gamma_{\text{CO(IR)}} =$	$\Gamma_{\text{CO(IR)}} =$

(e) IR 스펙트럼의 분석으로부터 합성된 $\text{Ti}(\text{CO})_4$ 의 구조를 예측하라.

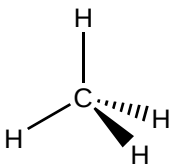
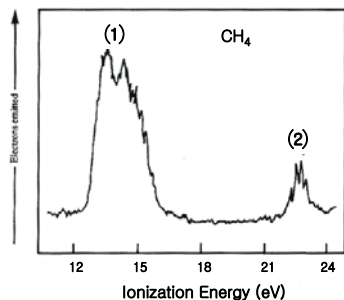
구조	
----	--

(참고: 어떤 분자에서 10개의 IR-active한 진동 모드가 있고, 그 표현이 $\Gamma_{\text{vib(IR)}} = A_1 + 2E + 2T_2$ 일 경우 IR 스펙트럼에서 5개의 peak가 보인다.)

(f) <IR 스펙트럼>에 나타난 신축진동 모드를 아래의 그림 중 해당하는 구조에 C-O 사이의 화살표로 나타내고 대칭성(Symmetry type)을 써라.

Symmetry type	Symmetry type
Symmetry type	Symmetry type
Symmetry type	Symmetry type
Symmetry type	Symmetry type

4. (5+10+15+10+10+10+10+10=80점) 다음은 CH₄의 photoelectron spectrum 이다. CH₄의 분자오비탈(MO) 에너지 준위도를 건설하고 (1), (2) peak가 각각 어떤 MO에 해당하는지 알아보고자 한다. 이래 물음에 답하라.



<참고: 지표표>

	E	8C ₃	3C ₂	6S ₄	6σ _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)

(a) CH₄의 점군? (이 문항이 틀리면 4번 문제는 무조건 0 점. 정답을 10 점을 주고 구입할 수 있음)

- 4개의 수소 1s 오비탈로부터 군오비탈(group orbital)을 건설하고자 한다.

(b) 아래에 4개의 수소 1s 오비탈에 대한 가약표현을 쓰고 가약표현을 가약표현의 합으로 나타내어라.

	E	8C ₃	3C ₂	6S ₄	6σ _d
Γ _{4H}	4				
Γ _{4H} =					

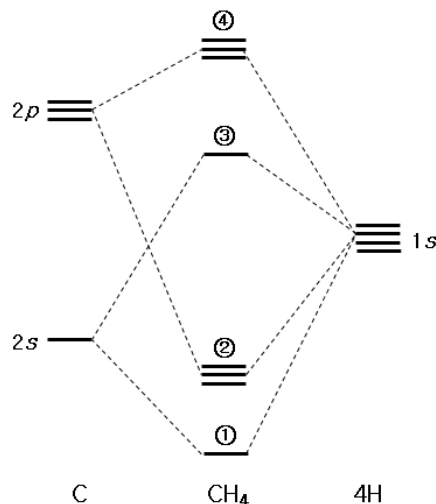
(c) (b)의 결과를 바탕으로 4개 군오비탈의 모양을 그리고 대칭성(symmetry type)을 결정하여라.(아래 그림에서 원은 수소의 1s 오비탈을 나타낸다. 서로 다른 위상을 A, B로 구분하여 표시하라. 4개의 군오비탈 중 하나는 아래에 표시하였다.)

Symmetry type	Symmetry type
Symmetry type	Symmetry type

(d) C의 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z 오비탈의 symmetry type을 결정하여라.

오비탈	Symmetry Type	오비탈	Symmetry Type
2s		2p _x	
2p _y		2p _z	

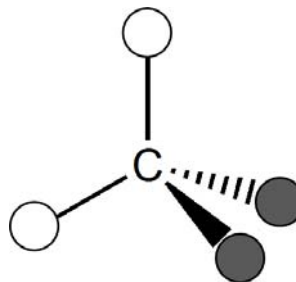
- 다음은 CH₄의 MO 에너지 준위도이다.



(e) MO ①, ②, ③, ④의 이름은? (같은 이름일 경우 낮은 에너지 준위의 MO부터 1, 2, ...로 구분할 것)

①		②		③		④	
---	--	---	--	---	--	---	--

(f) 아래 그림은 수소의 1s 군 오비탈 중 하나를 그린 것이다.(위상은 음영으로 구분되어 있다.) 그림 위에 3중 축퇴된 MO ④ 중 하나를 그려라.



(g) CH₄의 photoelectron spectrum에서 (1), (2)의 peak는 각각 (e)의 어느 MO에 있는 전자에 대한 Ionization energy 인가?

(1)		(2)	
-----	--	-----	--

(h) CH₄의 photoelectron spectrum을 VB Theory(원자가결합이론)로 설명 가능한가 불가능 한가? 그 이유는?

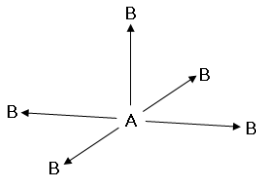
5. (5+5+20+10=40점) Square pyramidal(사각뿔) AB_5 분자에서 A원자에서 형성될 혼성오비탈을 구하고자 한다.

<참고: 지표표>

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	R_z	$x^2 - y^2$
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	(R_x, R_y)	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	(R_x, R_y)	xy
E_g	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1		
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1		
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		
E_u	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0		

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
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	$(x, y), (R_x, R_y)$	(xz, yz)

(a) 혼성오비탈을 아래와 같이 A에서 B로 향하는 5개의 화살표로 표시할 때, 이에 대한 기약표현을 구하라. (적당한 지표표를 골라 적을 것. 잘못 고르면 5번은 무조건 0점)



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

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ					

(b) (a)의 기약표현을 기약표현의 합으로 써라.

$$\Gamma = 2A_1 + B_1 + \underline{\hspace{2cm}}$$

(c) 위의 분석으로 보았을 때 가능한 혼성오비탈을 모두 쓰고, 각 혼성오비탈을 만드는 데 참여한 A의 원자오비탈 5개를 써라.(혼성오비탈에 s, p 오비탈은 각각 적어도 하나씩 포함된다. 줄은 필요 이상으로 주어져 있다.)

혼성오비탈 이름	참여한 A의 원자 오비탈

(d) (c) 위의 결과 중 구조와 원자오비탈의 방향으로 보았을 때 좀 더 유리한 혼성오비탈 이름 2개를 써라.

6. (20점) 다음 화합물의 이름 또는 화학식을 써라.(화학식에 oxalato 리간드는 ox로 표시할 것)

화학식	이름
$[\text{Co(en)}_2(\text{CO}_3)]\text{Cl}$	
	Potassium diaquabis(oxalato)manganate(III)
$[\text{PtCl}_4]^{2-}$	
	diamminetetra(isothiocyano)chromate(III)

7. (36점) 다음 빈칸을 채워라.(만일 입체이성질현상을 보이는 화합물이면 이름 앞에 구별하는 접두어, absolute configuration 등을 써라.)

구조	화학식	점군	d전자 개수
	이름		
구조	화학식	점군	d전자 개수
	이름		
구조	화학식	점군	d전자 개수
	이름		

8. (20점) MA_3B_2C (M=metal, A,B,C=ligands)의 착화합물에서 모두

가지의 기하이성질체를 가지고 있다. 그 중 광학활성을 보이는 것이 있으면 yes 또는 no로 답하라.(줄은 필요 이상 주어져 있다. 위의 네 모에 있는 수 만큼만 구조를 그릴 것)

광학활성?	광학활성?
광학활성?	광학활성?
광학활성?	광학활성?