

** 분자가 가진 대칭성 판단

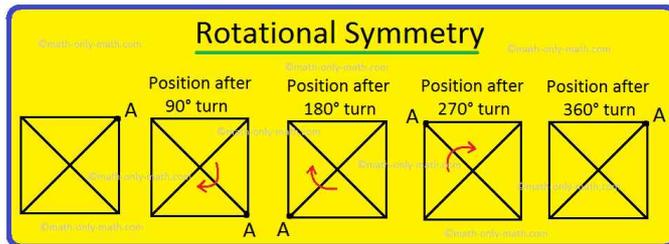
1. 대칭 요소와 대칭 조작

1.1. 대칭 요소

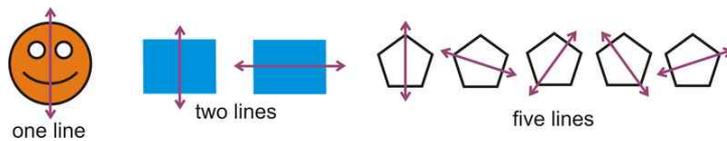
- 분자가 가진 대칭적 모습을 나타낸 것이다.
- 점, 선, 면, 축 등으로 대칭을 나타낼 수 있는 요소를 말한다.

1.2. 대칭 조작

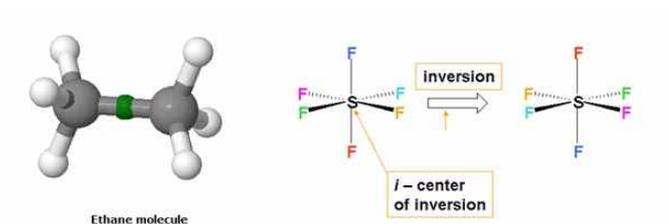
- 대칭 요소에 대해 원래의 위치와 구별이 불가능한 위치로 옮겨 놓는 조작이다.
- 대칭 조작의 종류
 - 동등 조작(E) : 분자에 아무런 조작을 가하지 않는 것으로 모든 분자는 동등 조작을 가지고 있다.
 - 회전 조작(C_n) : 대칭축을 중심으로 $\frac{360^\circ}{n}$ 돌리는 것을 뜻한다. 양의 값은 시계 방향, 음의 값은 반시계 방향이고, 주축은 n 값이 가장 큰 것을 선택한다.



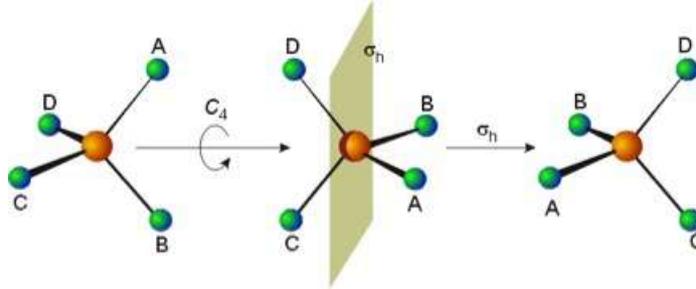
- 반사 조작(거울면, σ) : 분자의 반사 조작은 거울면을 뜻한다.



- 반전 조작(i) : 분자의 중심점에 대해 반대 방향으로 같은 거리로 이동한다. 수학에서 원점 대칭과 같다. 반전 중심에 항상 원자가 있어야 하는 것은 아니다.



- 회전 반사(반사 회전) 조작(S_n) : $\frac{360^\circ}{n}$ 회전시킨 후 회전축 수직면에 반사시키는 조작이다.



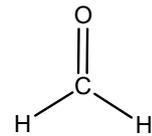
(ex) 다음 대칭 조작에 대하여 설명하시오.

- C_2 를 주축으로 가지는 분자는 몇 도 회전하면 분자를 구분할 수 없는가?
- HCHO 분자에 들어 있는 거울면(σ)은 어떤 것인가?
- 착이온 $[\text{FeCl}_6]^{3-}$ 에 있는 반전 중심(i)을 바르게 나타내면?
- S_4 는 어떤 조작을 의미하는가?

[풀이]

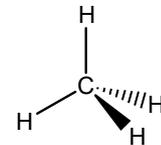
① 주축이 C_2 이므로 $\frac{360^\circ}{2} = 180^\circ$ 이다.

② HCHO 구조가 오른쪽 그림과 같으므로 C_2 축을 포함하며 서로 수직인 두 개의 거울면(σ_v, σ_v')을 가진다.



③ $[\text{FeCl}_6]^{3-}$ 착이온은 팔면체형으로 반전 중심은 Fe^{3+} 이다.

④ CH_4 는 오른쪽 그림과 같은 정사면체형으로 S_4 는 C_4 조작과 C_4 축에 직각인 면을 중심으로 거울면 조작(σ)을 연속적으로 한 것이다. C_4 조작은 분자를 $\frac{360^\circ}{4} = 90^\circ$ 회전시킨 것을 의미한다.



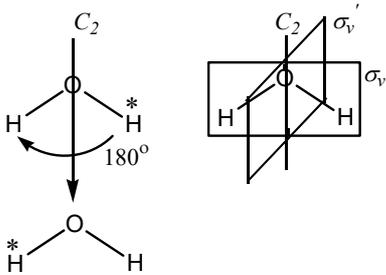
- $S_1 = \sigma$ 이고, $S_2 = i$ 이다.
- C_3 조작을 연속 2번하는 경우는 C_3^2 이고, $C_3^3 = E$ 이다.
- $C_2 = C_6^3$ 이고, $C_2 = S_4^2$ 이다.

2. 점군(point group)

몇 가지 분자들의 점군을 확인해 본다.

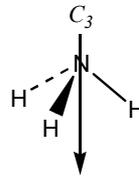
2.1. H₂O (C_{2v})

H₂O는 주축으로 C₂(180° 회전)가 있고 이 축에 수직인 거울면 (σ_v, σ_v')을 가진다.



2.2. NH₃ (C_{3v})

NH₃는 C₃ 주축을 가지고, σ_v를 가진다.



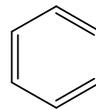
2.3. CH₄ (T_d)

CH₄는 정사면체형으로 C₄, C₂, S₄를 가지고, ¹²⁹⁾σ_d를 가진다.

2.4. CO₂ (D_{∞h})

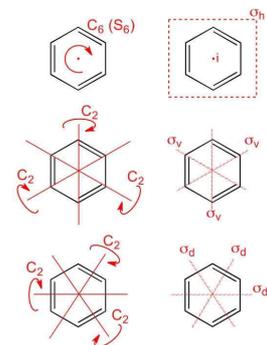
CO₂에는 σ_v', S₂가 있다. CO₂의 반전 중심은 C 원자에 있고, 에텐(CH₂=CH₂)의 반전 중심은 탄소 원자 사이의 이중 결합 한 가운데 존재하지만, H₂O는 반전 중심이 없다.

(ex) 벤젠 분자는 분자식이 C₆H₆이다. 벤젠 분자가 어떤 대칭 조작을 가지는가.



[풀이]

그림은 탄소와 수소를 생략해 나타낸 것이며 벤젠 구조는 이중 결합과 단일 결합이 번갈아 나오는 구조로 표현되지만 실제로는 전자의 비편재화로 결합 차수가 1.5이다. 벤젠 분자는 C₆ (S₆) 주축을 가지며, 반전 중심(i)과 σ_h, σ_v, σ_d를 가지며, C₂축을 가진다. 점군은 D_{6h}에 속한다.



129) d는 dihedral로 이면각을 뜻하는데, 두 면이 교차할 때 생기는 각이다.