

## \*\* 분자가 가진 대칭성 판단

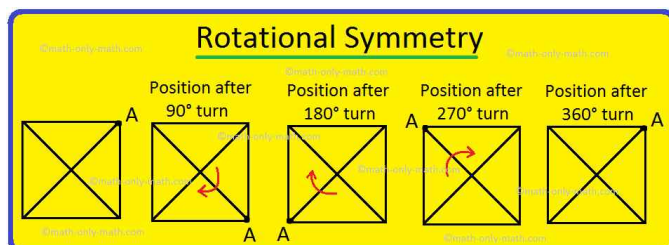
### 1. 대칭 요소와 대칭 조작

#### 1.1. 대칭 요소

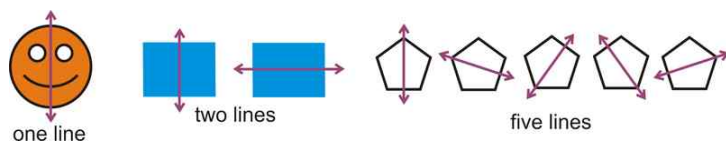
- 분자가 가진 대칭적 모습을 나타낸 것이다.
- 점, 선, 면, 축 등으로 대칭을 나타낼 수 있는 요소를 말한다.

#### 1.2. 대칭 조작

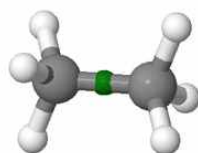
- 대칭 요소에 대해 원래의 위치와 구별이 불가능한 위치로 옮겨 놓는 조작이다.
- 대칭 조작의 종류
  - 동등 조작( $E$ ) : 분자에 아무런 조작을 가하지 않는 것으로 모든 분자는 동등 조작을 가지고 있다.
  - 회전 조작( $C_n$ ) : 대칭축을 중심으로  $\frac{360^\circ}{n}$  돌리는 것을 뜻한다. 양의 값은 시계 방향, 음의 값은 반시계 방향이고, 주축은  $n$  값이 가장 큰 것을 선택한다.



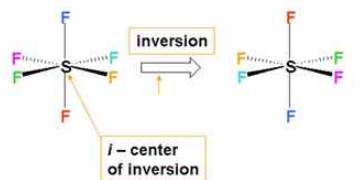
- 반사 조작(거울면,  $\sigma$ ) : 분자의 반사 조작은 거울면을 뜻한다.



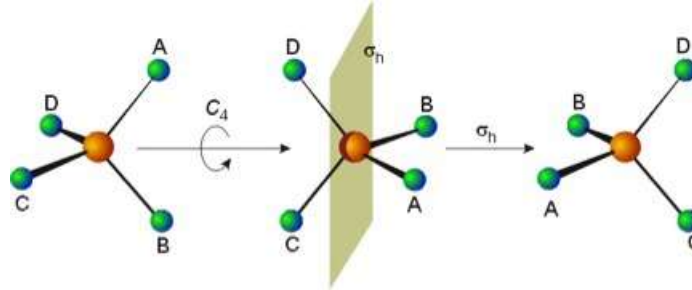
- 반전 조작( $i$ ) : 분자의 중심점에 대해 반대 방향으로 같은 거리로 이동한다. 수학에서 원점 대칭과 같다. 반전 중심에 항상 원자가 있어야 하는 것은 아니다.



Ethane molecule



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



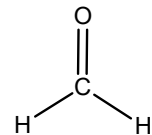
(ex) 다음 대칭 조작에 대하여 설명하시오.

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

[풀이]

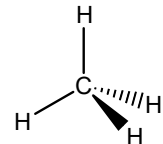
- 주축이  $C_2$ 이므로  $\frac{360^\circ}{2} = 180^\circ$ 이다.

- HCHO 구조가 오른쪽 그림과 같으므로  $C_2$ 축을 포함하며 서로 수직인 두 개의 거울면( $\sigma_v, \sigma_v'$ )을 가진다.



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

- $\text{CH}_4$ 는 오른쪽 그림과 같은 정사면체형으로  $S_4$ 는  $C_4$  조작과  $C_4$ 축에 직각인 면을 중심으로 거울면 조작( $\sigma$ )을 연속적으로 한 것이다.  $C_4$  조작은 분자를  $\frac{360^\circ}{4} = 90^\circ$  회전시킨 것을 의미한다.



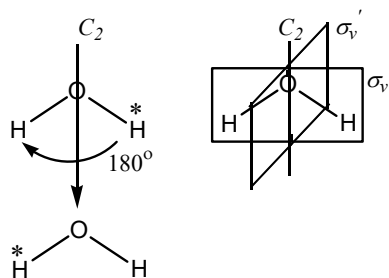
- $S_1 = \sigma$ 이고,  $S_2 = i$ 이다.
- $C_3$  조작을 연속 2번하는 경우는  $C_3^2$ 이고,  $C_3^3 = E$ 이다.
- $C_2 = C_6^3$ 이고,  $C_2 = S_4^2$ 이다.

## 2. 점군(point group)

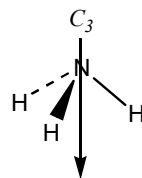
몇 가지 분자들의 점군을 확인해 본다.

2.1.  $\text{H}_2\text{O}$  ( $C_{2v}$ )

$\text{H}_2\text{O}$ 는 주축으로  $C_2$ ( $180^\circ$  회전)가 있고 이 축에 수직인 거울면 ( $\sigma_v, \sigma_v'$ )을 가진다.

2.2.  $\text{NH}_3$  ( $C_{3v}$ )

$\text{NH}_3$ 는  $C_3$  주축을 가지고,  $\sigma_v$ 를 가진다.

2.3.  $\text{CH}_4$  ( $T_d$ )

$\text{CH}_4$ 는 정사면체형으로  $C_4, C_2, S_4$ 를 가지고,  $^{129})\sigma_d$ 를 가진다.

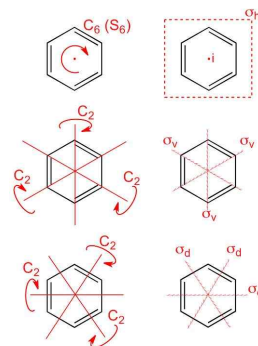
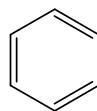
2.4.  $\text{CO}_2$  ( $D_{\infty h}$ )

$\text{CO}_2$ 에는  $\sigma_v', S_2$ 가 있다.  $\text{CO}_2$ 의 반전 중심은 C 원자에 있고, 에텐( $\text{CH}_2=\text{CH}_2$ )의 반전 중심은 탄소 원자 사이의 이중 결합 한 가운데 존재하지만,  $\text{H}_2\text{O}$ 는 반전 중심이 없다.

(ex) 벤젠 분자는 분자식이  $\text{C}_6\text{H}_6$ 이다. 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  $C_6$  ( $S_6$ ) 주축을 가지며, 반전 중심( $i$ )과  $\sigma_h, \sigma_v, \sigma_d$ 를 가지며,  $C_2$ 축을 가진다. 점군은  $D_{6h}$ 에 속한다.



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