

1. 대칭성

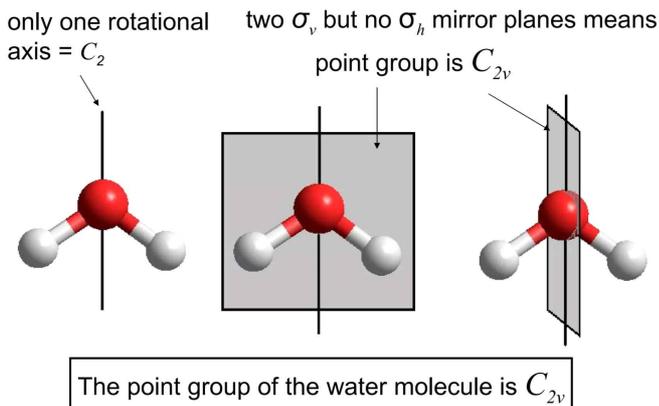
1.1. 대칭 조작

- 1.1.1. 동등 조작(E) : 분자에 아무런 변화를 일으키지 않는 조작으로 모든 분자에 존재하는 것으로 본다.
- 1.1.2. 회전 조작(C_n) : 대칭축을 중심으로 $\frac{360^\circ}{n}$ 만큼 돌리는 것이다. 주축은 n 이 최대인 것으로 선택한다. 오른쪽(시계 방향)으로 회전하면 (+), 왼쪽(반시계 방향)으로 회전하면 (-)를 뜻한다.
- 1.1.3. 반사 조작(σ) : 거울면으로 대칭성으로 나타낸다. 주축을 포함하는 거울면을 σ_v , 주축에 수직인 거울면을 σ_h , 두 개의 C_2 사이를 이등분하는 수직 거울 평면을 σ_d 라 한다. 모든 평면 분자에는 적어도 하나의 거울면이 있다.
- 1.1.4. 회전 반사 조작(S_n) : $\frac{360^\circ}{n}$ 만큼 회전시킨 후, 회전축에 수직인 면에 반사시키는 조작
- 1.1.5. 반전 조작(i) : 분자의 중심점에 대해 반대 방향으로 같은 거리로 이동하는 조작인데, 수학적으로는 원점 대칭과 같다.

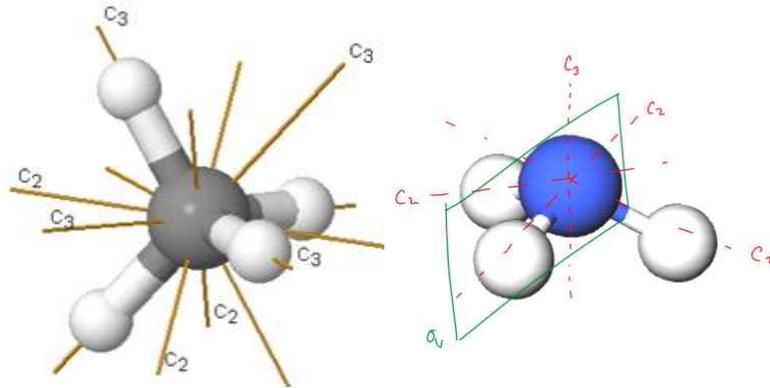
1.2. 주요 점군

- 1.2.1. C_{2v} : C_2 축을 가지고 σ_v 를 가진다. 예) H_2O , SO_2Cl_2

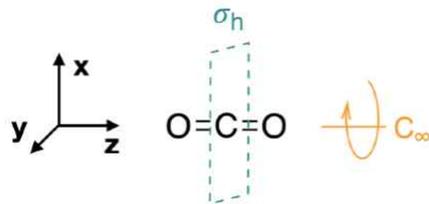
The determination of point groups of molecules



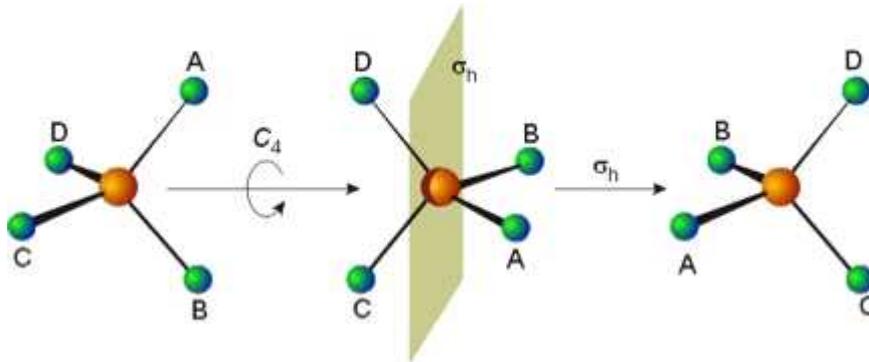
1.2.2. C_{3v} : C_3 축을 가지고, σ_v 를 가진다. 예) NH_3 , POCl_3



1.2.3. $D_{\infty h}$: ∞ 의 C_2 축과 σ_v 가 있고, i 와 S_ϕ 가 존재한다. 예) CO_2 , H_2 , $\text{HC}\equiv\text{CH}$



1.2.4. T_d : C_2 축과 C_3 축이 있고, S_4 와 σ_d 가 있다. 예) CH_4 , SiCl_4



[연습 문제]

1. NH₃ 분자가 가진 σ_v 평면 개수를 바르게 나타낸 것은?

- ① 2 ② 3 ③ 4
④ 5 ⑤ 6

답 : 2

2. 다음 중 안정한 상태에서 반전 중심(*i*)을 가지고 있는 분자는?

- ① CO₂ ② BF₃ ③ LiF
④ HCN ⑤ CH₄

답 : 1

3. 벤젠(C₆H₆) 분자가 가진 거울면은 몇 개인가?

- ① 3 ② 6 ③ 7
④ 9 ⑤ 12

답 : 3

4. 다음 점군(point group)과 해당하는 분자들을 바르게 짝지은 것은?

- | <u>C_{2v}</u> | <u>C_{3v}</u> |
|---------------------------------------|-------------------------------------|
| ① H ₂ O, SOCl ₂ | CH ₄ , SiCl ₄ |
| ② CH ₄ , SiCl ₄ | H ₂ O, SOCl ₂ |
| ③ CO ₂ , HClO ₂ | NH ₃ , POCl ₃ |
| ④ H ₂ O, SOCl ₂ | NH ₃ , POCl ₃ |
| ⑤ NH ₃ , POCl ₃ | H ₂ O, SOCl ₂ |

답 : 4

9. 원자 오비탈은 $s, p, d \dots$ 등이 있다. 다음 중 대칭 중심(반전 중심)이 있는 원자 오비탈만을 모두 고른 것은?

- ① s ② p ③ d
④ p, d ⑤ s, p, d
답 : 4

10. 다음 분자들 중 반전 중심이 원자에 있는 것은?

- ① H_2O ② CH_4 ③ BF_3
④ PCl_5 ⑤ SF_6
답 : 5

11. 다음 중 120° 를 회전시키면 분자를 구분할 수 없는 경우를 고르면?

- ① PCl_3 ② $CH_2 = CH_2$ ③ CO_2
④ XeF_4 ⑤ SF_6
답 : 1

12. 회전 반사 조작(또는 반사 회전 조작)은 회전 조작과 반사 조작이 연속해 이루어진다. 다음 중 S_4 를 가지고 있지 않은 분자는?

- ① SeF_6 ② $SiCl_4$ ③ $CH_2 = CH_2$
④ XeF_4 ⑤ $CH_2 = C = CH_2$
답 : 3