

عنوان درس: کاربرد نظریه گروه در شیمی

۱- ترکیب SALC مربوط به اوربیتال اتمی $d_x^2 - y^2$ در کمپلکس های هشت وجهی کدام گزینه است؟

۱. $1/2(\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4)$ ۲. $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_5 - \phi_6)$

۳. $\frac{1}{\sqrt{12}}(2\phi_5 + 2\phi_6 - \phi_1 - \phi_3 - \phi_2 - \phi_4)$ ۴. $\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_3)$

۲- در جدول زیر نماد کاهش ناپذیر Γ نشاندهنده کدام نماد مولیکن می باشد؟

$2\sigma_d$	$2\sigma_v$	C_2	$2C_4$	E	C_{4v}
0	0	-2	0	2	Γ

۱. E ۲. B_2 ۳. A_1 ۴. B_1

۳- اوربیتالهای d_{xy} , P_x در گروه نقطه D_{2h} بترتیب از راست به چپ در کدام نمایشگرها ظاهر می شوند؟

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
B_{1g}	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
B_{2g}	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
B_{3g}	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
A_u	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1
B_{1u}	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
B_{2u}	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
B_{3u}	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1

۱. B_{2g}, B_{1u} ۲. B_{3g}, A_u ۳. B_{1g}, B_{3u} ۴. B_{3g}, B_{2u}

۴- در جدول زیر نماد کاهش ناپذیر Γ نشاندهنده کدام نماد مولیکن می باشد؟

$2\sigma_d$	$2C'_2$	C_2	$2S_4$	E	D_{2d}
1	-1	1	-1	1	Γ

۱. A_1 ۲. E ۳. B_1 ۴. B_2

۵- اربیتال P_z در گروه نقطه‌ای C_{4h} در کدام نمایشگر ظاهر می‌شود؟

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)

E_u .۴

B_u .۳

A_u .۲

B_g .۱

۶- در گروه نقطه‌ای C_2 کدام حاصلضرب درست نمی‌باشد؟

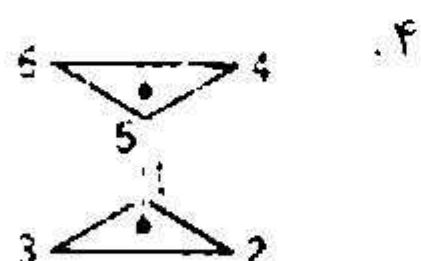
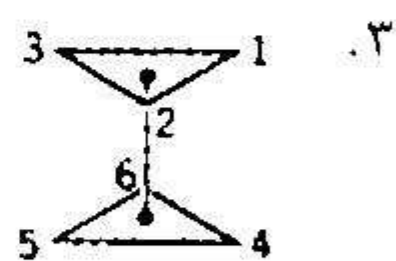
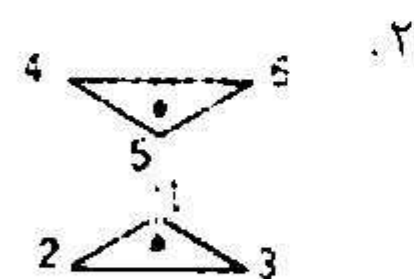
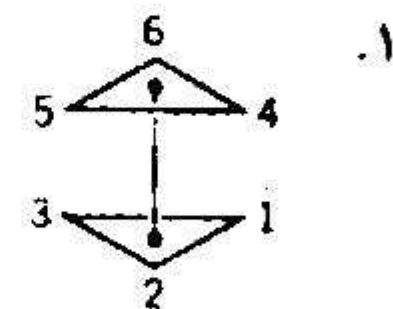
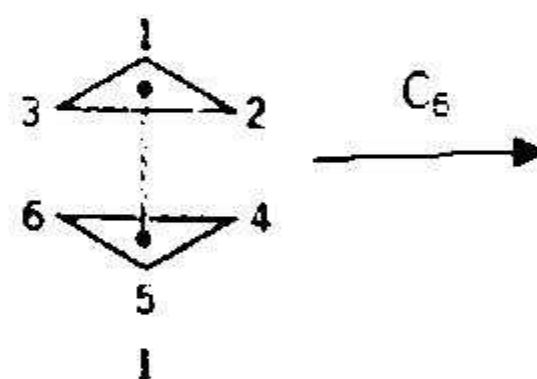
$B \times B = A$.۱

$A \times A = A$.۲

$A \times B = A$.۳

$A \times B = B$.۴

۷- شکل نهایی را بعد از انجام اعمال تقارنی زیر بدست آورید؟



۸- مولکول $trans - [CoCl_2(NH_3)_4]^+$ متعلق به کدام گروه است؟

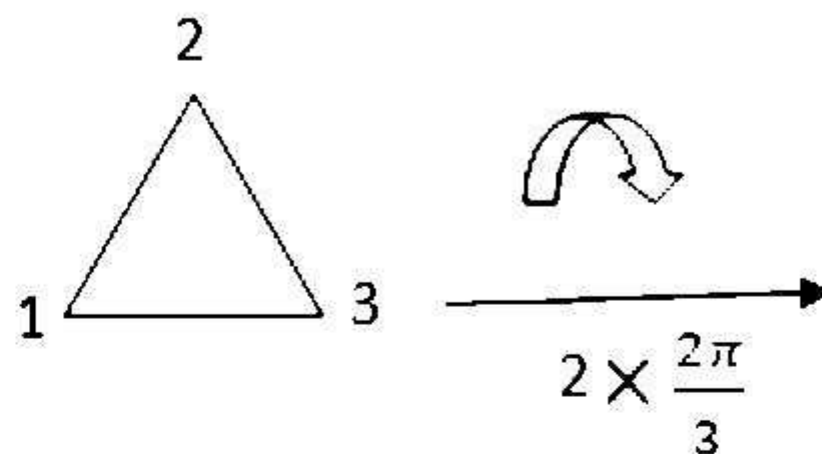
C_{4h} .۱

D_{4h} .۲

D_{3h} .۳

D_{2h} .۴

۹- کدام گزینه صحیح است؟



۱. ۲. ۳. ۴.

۱۰- کدام یک از مولکول های زیر فاقد مرکز تقارن است؟

۱. مولکول های AB_6 هشت وجهی
۲. مولکول های AB_4 مسطح
۳. اتیلن
۴. $C_5H_5^-$

۱۱- مولکول $[AuCl_4]$ چند صفحه تقارن دارد؟

۱. ۳ ۲. ۵ ۳. ۴ ۴. ۲

۱۲- گروه نقطه ای گونه ClF_3 چیست؟

۱. D_{3d} ۲. C_{2v} ۳. C_{4v} ۴. D_{2d}

۱۳- گروه نقطه ی ترکیب $Al(OH)_3$ چیست؟

۱. C_{3h} ۲. C_{3v} ۳. D_{3d} ۴. D_{3h}

۱۴- در مولکول AlR_3 هیبریداسیون اتم مرکزی کدام یک از گزینه های زیر نمی تواند باشد؟

۱. p^3 ۲. d^3 ۳. dp^2 ۴. sd^2

۱۵- مرتبه گروه برای کدام گروه نقطه ی بالاترین مقدار را دارد؟

۱. D_{2d} ۲. D_{3d} ۳. D_4 ۴. D_{4d}

۱۶- در ملکول C_4H_4 انرژی اربیتال ملکولی پایه با تقارن D_{4h} طبق محاسبات هوکل کدام است؟

۱. $\alpha + 2\beta$ ۲. $\alpha - 2\beta$ ۳. $\alpha + \beta$ ۴. $\alpha - \beta$

۱۷- مولکول $C_{10}H_8$ دارای چند سطح انرژی اوربیتالی مختلف است؟

۱. ۱۰ ۲. ۱۲ ۳. ۱۵ ۴. ۶

۱۸- کدامیک از مولکول های زیر دارای محور چرخشی مرکب است؟

۱. $XeOF_4$ ۲. $[Ni(en)_3]^{2+}$ ۳. NH_3 ۴. H_2O

۱۹- در مولکول SO_3 ، Γ_g به صورت کدام گزینه است؟

$$D_{3h} \quad E \quad 2C_3 \quad 3C_2 \quad \sigma_h \quad 2S_6 \quad 3C_2$$

A_1^+	1	1	1	1	1	1
A_2^+	1	1	1	1	1	1
E^+	2	-1	0	2	1	0
A_1^-	1	1	1	-1	-1	-1
A_2^-	1	1	-1	-1	-1	1
E^-	2	1	0	2	1	0

۱. $A_1' + E' + T_2'$ ۲. $A_1' + E'$ ۳. $A_1'' + E'' + T_2''$ ۴. $A_1'' + E''$

۲۰- عمل تقارنی S_5^5 با کدام یک معادل است؟

۱. σ_h ۲. i ۳. C_5 ۴. E

سوالات تشریحی

۱- تقارن کلیه ارتعاش های موجود در مولکول متان دارای تقارن Td را به دست آورید. کدام ارتعاشات در طیف IR و کدام در طیف رامان فعال است؟

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_3	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
1	12	0	2

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	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

۳- تقارن کلیه ارتعاش‌های موجود در مولکول NH_3 (یعنی Γ_{vib}) را به دست آورید. انتظار دارید چند نوار در طیف IR و چند نوار در طیف رامان NH_3 مشاهده کنید؟

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	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

۴- مولکول BF_3 دارای تقارن D_{3h} است. نمایش‌های کاهش‌ناپذیر $\Gamma_{\text{B-F}}$ را در این مولکول را بدست آورید؟

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_6$	$3\sigma_v$		
A_1'	1	1	1	1	1	1	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
A_2'	1	1	-1	1	1	-1		
E'	2	-1	0	2	-1	0		$(x^2 - y^2, xy)$
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1	z	
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1		
E''	2	-1	0	2	1	0		(xz, yz)

۵- کمپلکس‌های فلز واسطه ML_4 با شکل هندسی مسطح مربعی را در نظر بگیرید. کدام آرایش‌های d^n باعث انحراف یان-تلر می‌شوند؟

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2\sigma_h$	σ_v	$2\sigma_d$	$2C_2$		
d_{xy}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_g	$e_g^2 - t_g^2 - e_g^2$
$d_{x^2-y^2}$	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1		
d_{xz}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_g	$e_g^2 - t_g^2$
d_{yz}	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1		A_g
d_{z^2}	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	R_g	A_g
d_{xz}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
d_{yz}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_g	
d_{z^2}	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1		
d_{xz}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	R_g	
d_{yz}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
d_{z^2}	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	R_g	

۶- جدول ضرب گروه، جدولی است که در آن حاصل ضرب تک تک اعضای گروه آورده شود. جدول ضرب مربوط به گروه C_{2h} را بنویسید. این گروه حاوی چهار عمل E ، C_2 ، i و σ_h است [راهنمایی: اثرات این عمل‌ها را بر یک نقطه‌ای دلخواه با مختصات اولیه (x, y, z) تعیین کنید. در گروه‌های آبلی، ضرب عمل‌های تقارنی جابه‌جاپذیر است. آیا این گروه، آبلی است؟]

پاسخ صحیح شمارہ سوال

1	الف
2	الف
3	ج
4	ج
5	ب
6	ج
7	ج
8	ب
9	ب
10	د
11	ب
12	ب
13	الف
14	الف
15	د
16	الف
17	الف
18	الف
19	ب
20	الف

سوالات تشریحی

نمره ۱,۰۰

۱- $\Gamma = A_1 + E + T_1 + 3T_2$ ، در رامان و E و A_1 و T_2 هم در رامان و هم در IR فعال است.

نمره ۱,۰۰

۲-

$$\Gamma_g = 3A_1 + A_2 + 4E$$

نمره ۱,۰۰

۳- $\Gamma_{\text{vib}} = 2A_1 + 2E$ ، چهار نوار در طیف IR انتظار می‌رود.

نمره ۱,۰۰

$$\Gamma_{B-E} = A'_1 + E'$$

نمره ۱,۰۰

۵- فقط حالت‌های تبه‌گن در معرض انحراف‌های یان-تیلر قرار دارند. با فرض درست بودن ترتیب اوربیتال‌ها، فقط آرایش‌های الکترونی d^1 و d^3 به حالت‌های پای‌تب‌ه‌گن می‌انجامند و دچار انحراف می‌شوند. اگر اوربیتال‌های e_g بالای اوربیتال a_{1g} قرار داشته باشند، آرایش‌های حالت پای‌تب‌ه‌گن d^3 و d^5 تب‌ه‌گن خواهند بود و دچار انحراف می‌شوند. البته، هر حالت برانگیخته‌ای که در آن یک یا سه الکترون، اوربیتال‌های e_g را اشغال کنند نیز تب‌ه‌گن بوده به انحراف یان-تیلر خواهد انجامید.

نمره ۱,۰۰

۶- جدول ضرب این گروه عبارت است از:

همه ترکیب‌های دوتایی جابه‌جاپذیرند، لذا این گروه آبلی است. همچنین توجه دارید که قطری از Eها نشان می‌دهد که هر عمل با وارون خودش برابر است.

C_{2v}	E	C_2	i	σ_v
E	E	C_2	i	σ_v
C_2	C_2	E	σ_v	i
i	i	σ_v	E	C_2
σ_v	σ_v	i	C_2	E

۱- در گروه نقطه ای D_{3h} طبقه $2S_3$ وجود دارد، این طبقه شامل کدامیک از گزینه های زیر می باشد؟

۱. S_3^5, S_3^1 ۲. S_3^3, S_3^1 ۳. S_3^4, S_3^3 ۴. S_3^2, S_3^1

۲- کدام یک از مولکول های زیر فاقد مرکز تقارن است؟

۱. مولکول های AB_6 هشت وجهی ۲. اتیلن
۳. مولکول های AB_4 مسطح ۴. $C_5H_5^-$

۳- مولکول $[AuCl_4]$ چند صفحه تقارن دارد؟

۱. 3 ۲. 4 ۳. 2 ۴. 5

۴- کدام گزینه صحیح نمی باشد؟

۱. در مولکول H_2O دو صفحه تقارن هم ارز نیستند.
۲. در مولکول NH_3 سه صفحه تقارن هم ارز نیستند.
۳. محور های C_2 در مولکول بنزن هم ارز هستند.
۴. در مولکول BF_3 سه صفحه تقارن هم ارز هستند.

۵- عمل تقارنی S_5^5 با کدام یک معادل است؟

۱. σ_h ۲. E ۳. C_5 ۴. i

۶- گروه نقطه ای گونه ClF_3 چیست؟

۱. D_{3d} ۲. C_{2v} ۳. D_{2d} ۴. C_{4v}

۷- در مولکول AlR_3 هیبریداسیون اتم مرکزی کدام یک از گزینه های زیر نمی تواند باشد؟

۱. d^3 ۲. sd^2 ۳. p^3 ۴. dp^2

۸- تعداد نمایش های کاهش ناپذیر یک بعدی گروه C_{2h} کدام است؟

۱. 4 ۲. 2 ۳. 3 ۴. 1

۹- ماتریس زیر نشاندهنده کدام صفحه انعکاسی است؟

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

۱. σ_{xy} ۲. σ_{xz} ۳. σ_{yz} ۴. σ_d

۱۰- مرتبه گروه برای کدام گروه نقطه ی بالاترین مقدار را دارد؟

۱. D_4d ۲. D_2d ۳. D_3d ۴. D_4

۱۱- ترم های یون آزاد آرایش d^2 کدام است؟

۱. $^3F, ^1P, ^1G, ^3D$ ۲. $^3F, ^3P, ^1G, ^1D, ^1S$ ۳. $^3P, ^1G, ^1D, ^3S$ ۴. $^3P, ^1F$

۱۲- کدام گزینه در مورد نماد مولیکن صحیح نیست؟

۱. اگر نسبت به C_2 عمود بر محور چرخش اصلی متقارن باشد با زیروند 1 نشان می دهند ولی اگر نامتقارن باشد با زیروند 2 نشان می دهند.

۲. اگر نسبت به محور اصلی متقارن باشد با نماد Λ نشان می دهند ولی اگر نامتقارن باشد با نماد B نشان می دهند.

۳. اگر نسبت به صفحه موازی محور اصلی متقارن باشد با زیروند 1 نشان می دهند ولی اگر نامتقارن باشد با زیروند 2 نشان می دهند.

۴. اگر نمایش یک بعدی باشد با نماد Λ یا B اگر دو بعدی E اگر سه بعدی با T نشان می دهند.

۱۳- اربیتالهای p_y, d_{xy} در گروه نقطه ی C_{4v} بترتیب از در کدام نمایشگرها ظاهر می شوند؟

۱. B_2, E ۲. A_2, B_1 ۳. B_1, E ۴. B_2, B_1

۱۴- کدام مورد جزء پنج عنصر تقارنی نیست؟

۱. صفحه تقارن ۲. محور دوران محض ۳. مرکز تقارن ۴. محور پیچشی

۱۵- کدام عنصر تقارنی در مولکول BF_3 وجود دارد که در مولکول PF_3 موجود نمی باشد؟

۱. C_3 ۲. C_3^2 ۳. σ_v ۴. S_3

۱۶- کدامیک از مولکول های زیر دارای محور چرخشی مرکب نیست؟

۱. $[Ni(en)_3]^{2+}$ ۲. $B(OH)_3$ ۳. XeF_4 ۴. BCl_3

۱۷- اگر داشته باشیم $eg \times eg = {}^aA_1g + {}^bA_2g + {}^cEg$ کدام گزینه برای مقدار چندگانگی جملات طیفی امکانپذیر است؟

۱. $a=c=3, b=1$ ۲. $a=c=1, b=3$ ۳. $a=b=1, c=2$ ۴. $a=c=3, b=2$

۱۸- پایدارترین ترم آرایش d^8 کدام است؟

۱. 3P ۲. 1D ۳. 3F ۴. 1G

۱۹- در مولکول SO_3 ، Γ_σ به صورت کدام گزینه است؟

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	
A'_1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	1	1	1	1	1	1	R_z
E'	2	-1	0	2	-1	0	$(x, y) \quad (x^2 - y^2, 2xy)$
A''_1	1	1	1	1	1	1	
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1	Z
E''	2	-1	0	-2	1	0	$[R_x, R_y] \quad [xy, yz]$

۴. $A'_1 + E'$

۳. $A''_1 + E'' + T''_2$

۲. $A'_1 + E' + T'_2$

۱. $A''_1 + E''$

۲۰- در جدول زیر نماد کاهش ناپذیر Γ نشاندهنده کدام نماد مولیکن می باشد؟

$2\sigma_d$	$2\sigma_v$	C_2	$2C_4$	E	C_{4v}
0	0	-2	0	2	Γ

۴. A_2

۳. B_2

۲. A_1

۱. E

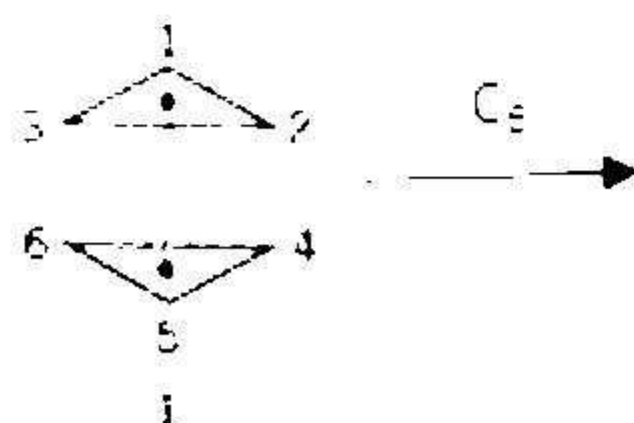
۳- در جدول زیر نماد مولیکن را برای نماد کاهش ناپذیر Γ بدست آورید؟

$D_{\infty h}$	E	$2C_2$	$2C_2^2$	$5C_2$	σ_h	$2S_6$	$2S_6^5$	σ_v
Γ	1	1	1	-1	1	1	1	-1

۴- اربیتالهای d_{xy} , P_x در گروه نقطه‌ای D_{6h} در کدام نمایشگرها ظاهر می‌شوند؟

D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	σ_h	$2S_6$	$2S_6^5$	σ_v	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
E_{1g}	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0
E_{2g}	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2u}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1u}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{2u}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
E_{1u}	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0
E_{2u}	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0

۵- شکل نهایی را بعد از انجام اعمال تقارنی زیر بدست آورید؟



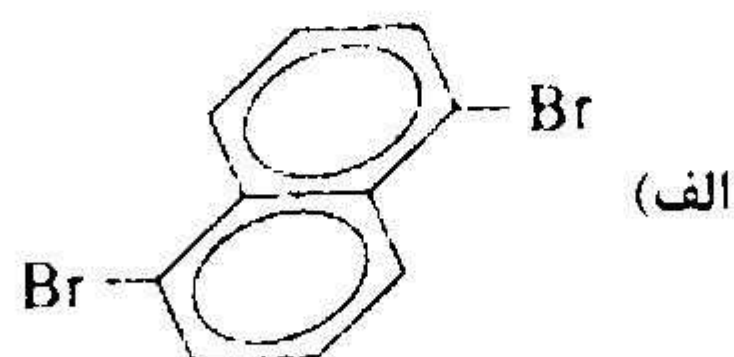
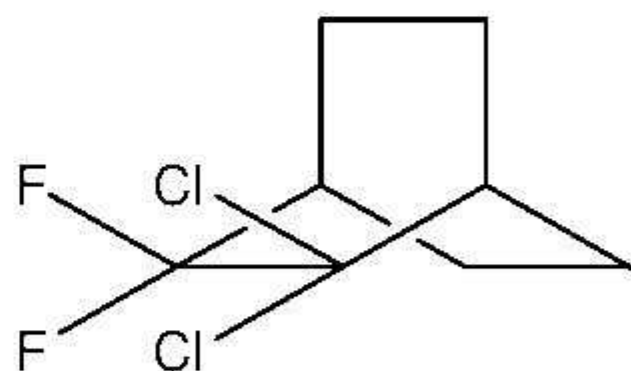
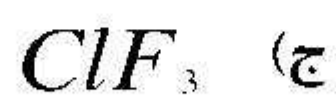
باسخ صحيح
نمبر
سوال

1	الف
2	د
3	د
4	ب
5	الف
6	ب
7	ج
8	الف
9	ج
10	الف
11	ب
12	الف
13	الف
14	د
15	د
16	الف
17	ب
18	ج
19	د
20	الف

۲- در مولکول SO_3 ، Γ_σ را بدست آورید؟

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$		
A'_1	1	1	1	1	1	1	R_z (x, y)	$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	1	1	-1	1	1	1-		
E'	2	1-	0	2	-1	0		$(x^2 - y^2, 2xy)$
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1	z (R_x, R_y)	
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1		
E''	2	-1	0	2-	1	0		(xz, yz)

۳- گروه نقطه ای مولکول های زیر را مشخص کنید؟



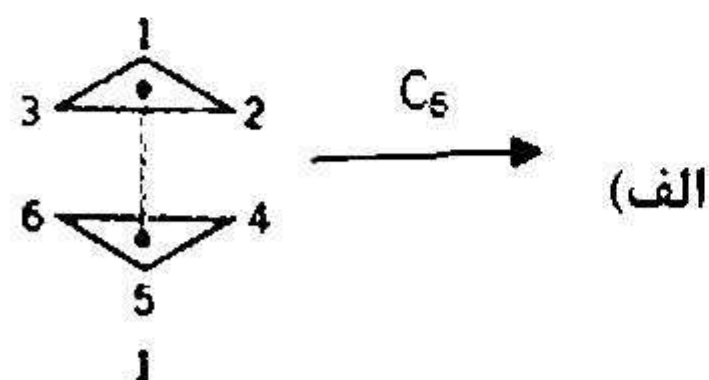
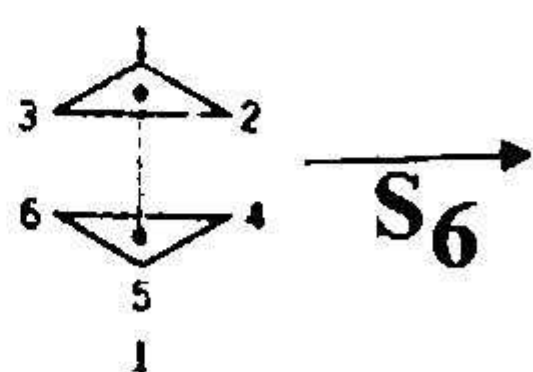
۴- اربیتالهای d_{yz}, P_z در گروه نقطه‌ی D_{2h} بترتیب از راست به چپ در کدام نمایشگرها ظاهر می‌شوند؟

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma_{(xz)}$	$\sigma_{(yz)}$
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
B_{1g}	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
B_{2g}	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
B_{3g}	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
A_u	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1
B_{1u}	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
B_{2u}	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
B_{3u}	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1

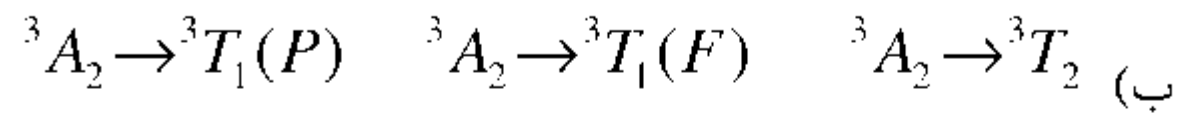
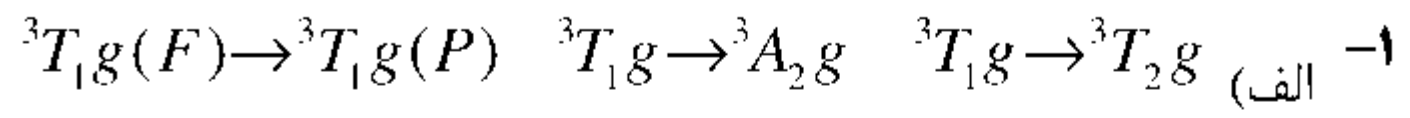
۵- اعمال تقارنی S_5^4 و S_5^5 را بدست آورید؟

۶- جدول مشخصات برای گروه نقطه‌ی C_{2v} را بدست آورید؟

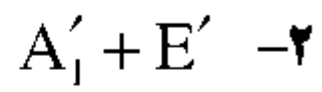
۷- شکل نهایی را بعد از انجام اعمال تقارنی زیر بدست آورید؟



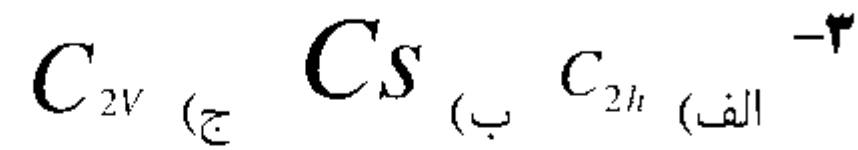
نمبر ١.٧١



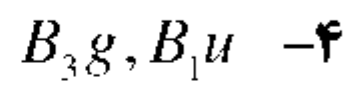
نمبر ١.٧١



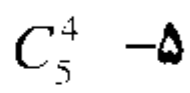
نمبر ١.٧١



نمبر ١.٧١



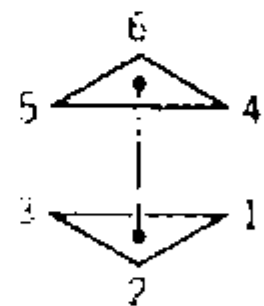
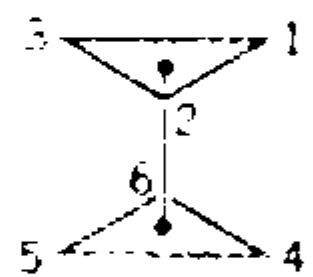
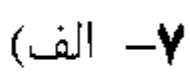
نمبر ١.٧١



نمبر ١.٧١



نمبر ١.٧٤



۱- گروه نقطه ای هر یک از مولکولهای زیر را تعیین کنید؟

الف) بنزن

ب) $ClHC = C = CHCl$ (ترانس)

ج) اتان فرم نپوشیده

د) SF_5Cl

۲- اعمال و عناصر تقارنی مولکول PF_5 و گروه نقطه ای و مرتبه گروه آن را بنویسید؟

۳- نمایش زیر را به مؤلفه‌های آن‌ها کاهش دهید؟

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_b	12	0	2

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	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

۴- با بهره‌گیری از ماتریس‌ها برای عمل‌های E ، $C_2(z)$ و ...؛ عمل‌های تقارنی هم‌ارز با هر یک از عمل‌های زیر را به دست آورید:

الف) $C_2(x) \times \sigma(xy)$

ب) $\sigma(xz) \times E \times i$

پ) $C_2(z) \times C_2(x) \times \sigma(yz)$

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$	$h = 4$	
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

۵- در کمپلکس $[V(H_2O)_6]^{+3}$ یون وانادیم دارای چه انتقالات مجازی از نظر اسپین است؟ ($V=23$)

۶- نمایش‌های کاهش‌ناپذیر Γ_{SF} را در در مولکول SF_6 به دست آورید؟

O_h	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$ ($=C_4^2$)	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2+y^2+z^2$
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	$2z^2-x^2-y^2$ x^2-y^2
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0	
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1	R_x, R_y, R_z
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1	$\{xz, yz, xy\}$
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0	
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1	$\{x, y, z\}$
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1	
Γ	6	0	2	2	0	0	0	4	0	2	

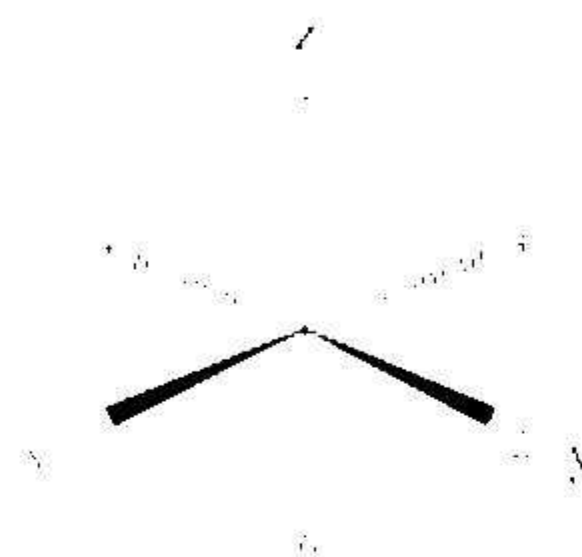
۷- تقارن کلیه ارتعاش‌های موجود در مولکول متان دارای تقارن T_d را به دست آورید. کدام ارتعاشات در طیف زیر قرمز و کدام در طیف رامان فعال است؟

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)

۸- چه نوع اوربیتال‌هایی در تشکیل پیوندهای Π در مولکول چهاروجهی AB_4 شرکت می‌کنند؟

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)

۱- با توجه به شکل زیر، SALC مربوط به اوربیتال اتمی d_{z^2} را بدست آورید؟

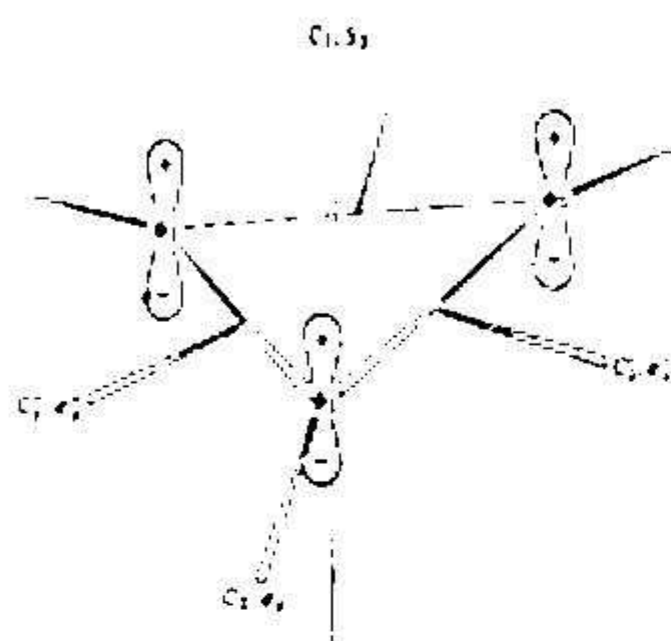


O_h	I	SC	$6C^\infty$	$6C$	$3C_2$	I	$6S_6$	$8C_3$	$3C_2$	$6C_6$	
A_1	1	1	1	1	3	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
E	2	1	0	0	2	2	0	1	2	0	$(2z^2 - x^2 - y^2), \sqrt{3}(x^2 - y^2)$
T_{2g}	3	0	1	1	2	3	1	0	1	1	(R_x, R_y, R_z)
T_{2g}	3	0	1	1	1	3	1	0	1	1	(xy, yz, zx)
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
E	2	1	0	0	2	2	0	1	2	0	
T_{2g}	3	0	1	1	1	3	1	0	1	1	(p_x, p_y, p_z)
T_{2g}	3	0	1	1	1	3	1	0	1	1	

۲- با استفاده از تقارن، سه هیبریداسیون برای مولکول $AuCl_4^-$ قابل انتظار است آنها را بدست آورید؟

D_{4h}	I	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	I	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	
A_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R
B_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 - y^2$
B_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	xy
E	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	$(R_x, R_y), (xz, yz)$
A	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
A	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	z
B_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
B_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
E	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	(x, y)

۳- برای شکل زیر نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma_{\pi(oop)}$ را بدست آورید.



D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	
A'_1	1	1	1	1	1	1	x^2+y^2, z^2
A'_2	1	1	1	1	1	1	R_z
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y) $(x^2-y^2, 2xy)$
A''_1	1	1	1	1	1	1	
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1	z
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R_x, R_y) (xy, yz)

۴- اربیتال P_z در گروه نقطه ی D_{6h} در کدام نمایشگرها ظاهر می شوند؟ توضیح دهید.

D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	i	$2S_6$	$2S_3$	σ_h	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
B_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
E_{1g}	2	1	-1	-2	0	0	2	1	-1	-2	0	0
E_{2g}	2	-1	-1	2	0	0	2	-1	-1	2	0	0
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
B_{1u}	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1
E_{1u}	2	1	-1	-2	0	0	-2	-1	1	2	0	0
E_{2u}	2	-1	-1	2	0	0	-2	1	1	-2	0	0

۵- جدول مشخصات برای گروه نقطه ی C_3 را بدست آورید؟

۶- کلیه عناصر تقارنی ملکول آلن C_3H_4 را بدست آورید؟

۷- اگر داشته باشیم $eg \times eg = {}^aA_1g + {}^bA_2g + {}^cEg$ مقدار چندگانگی جملات طیفی را بدست آورید؟

$$O_h \quad D_{4h}$$

$$A_{1g} \rightarrow A_{1g}$$

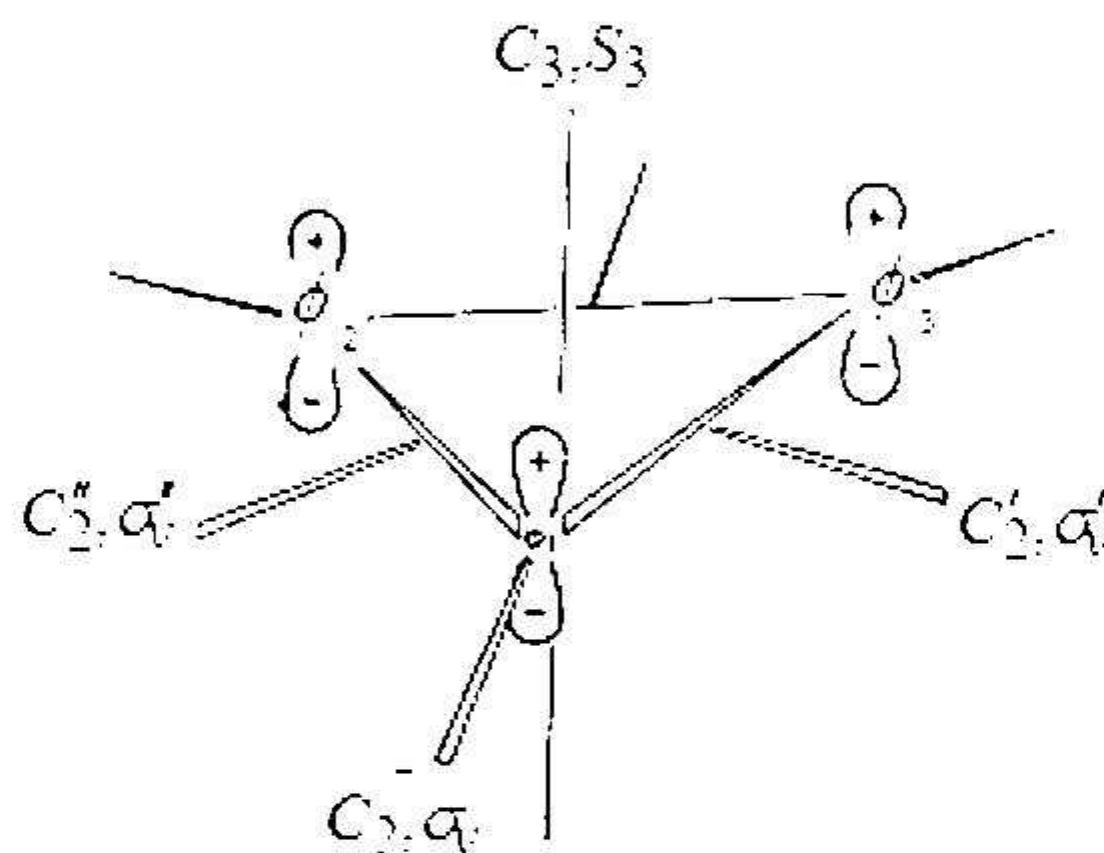
$$A_{2g} \rightarrow B_{1g}$$

$$E_g \rightarrow \begin{cases} A_{1g} \\ B_{1g} \end{cases}$$

<u>نمره ۷۱،</u>	$\frac{1}{\sqrt{12}}(2\phi_5 + 2\phi_6 - \phi_1 - \phi_3 - \phi_2 - \phi_4)$	۱-
<u>نمره ۷۱،</u>		۲-
<u>۱،۷۱ نمره</u>		۳- ف 6 ص 137
<u>۱،۷۱ نمره</u>		۴- ف 2 ص 41
<u>۱،۷۱ نمره</u>		۵- ف 4 ص 113
<u>۱،۷۱ نمره</u>		۶- ف 3 ص 63
<u>۱،۷۴ نمره</u>		۷- ف 9 ص 299

۱- برای شکل زیر نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma_{P\pi}$ را بدست آورید.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_6$	$3\sigma_v$	
A_1'	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A_2'	1	1	1	1	1	1	R_z
E'	2	-1	0	2	-1	0	$(x, y) \quad (x^2 - y^2, 2xy)$
A_1''	1	1	1	1	1	1	
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1	z
E''	2	1	0	2	1	0	$(R_x, R_y) \quad (xy, yz)$



۲- گروه نقطه‌ای ملکول‌های زیر را بدست آورید؟

- الف) $mer-[Ru(H_2O)_3Cl_3]$ ب) $fac-[Ru(H_2O)_3Cl_3]$ ج) $[Ni(en)_3]^{2+}$ د) $Cis-[Co(NH_3)_4Cl_2]^+$

۳- با استفاده از قاعده هوکل توابع موج اربیتال های ملکولی مربوط به سیستم π ملکول C_4H_4 را بدست آوردید؟

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)

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	$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z
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)

۴- در مولکول XeF_4 با تقارن D_{4h} چه اوربیتالهایی در تشکیل پیوند π شرکت می کنند؟

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	$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	R_z
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)

۵- جدول مشخصات برای گروه نقطه ی C_3 را بدست آورید؟

۶- در ملکول $[Co(en)_2Cl_2]^+$ کدام یک از انتقالات زیر از لحاظ ارتعاشی - الکترونی مجاز هستند؟

$$A_1g \rightarrow A_2g$$

$$A_1g \rightarrow B_2g$$

$$A_1g \rightarrow Eg$$

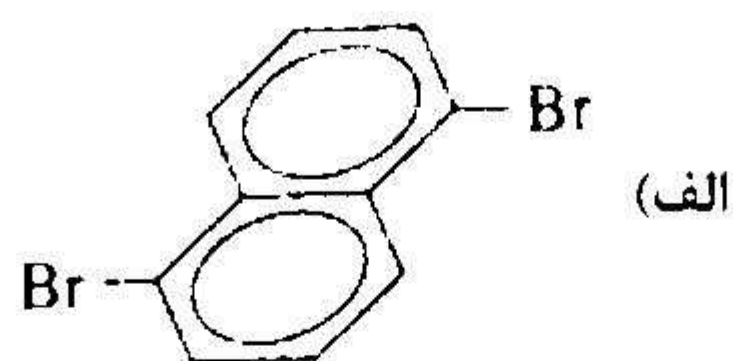
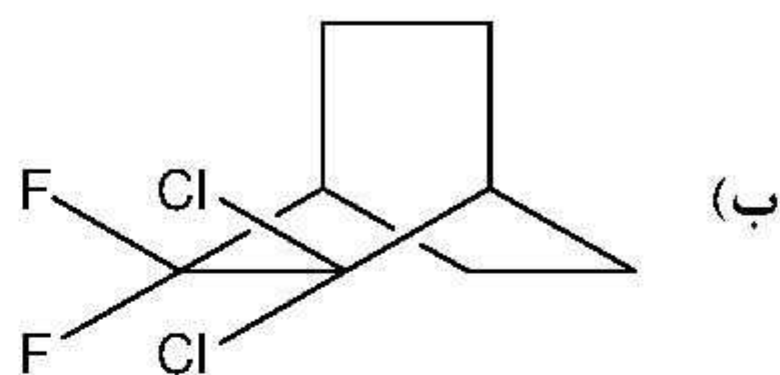
D_{2h}	E	C_2 (z)	C_2 (x)	C_2 (y)	i	σ (xy)	σ (xz)	σ (yz)
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
B_g	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
B_g	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
B_g	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
A_u	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1
B_u	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
B_u	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
B_u	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1

۷- Γ ارتعاشی برای ملکول RuO_4 را بدست آورید؟

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6\sigma_d$		
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)

۱- گروه نقطه ای مولکول های زیر را مشخص کنید؟

(ج) ClF_3

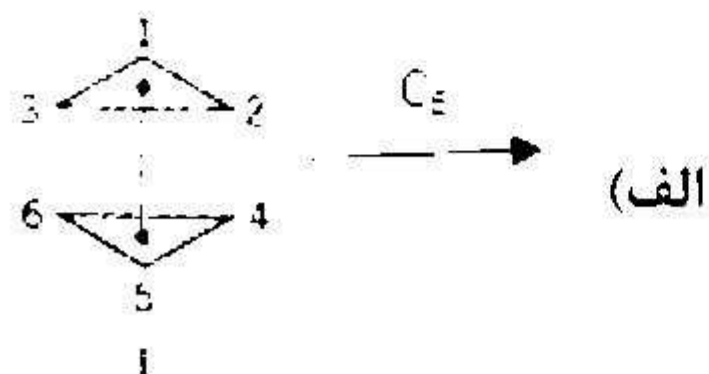
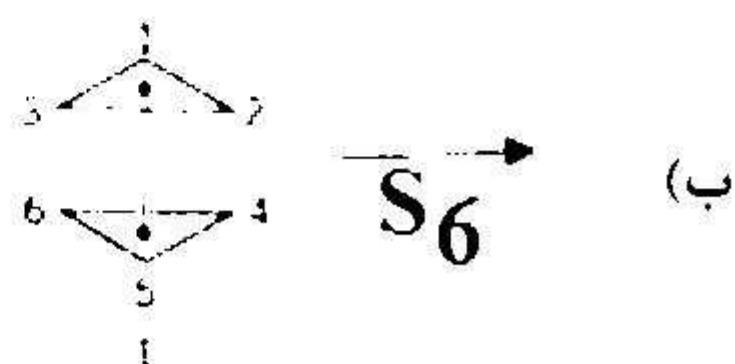


۲- اعمال تقارنی S_5^4 و S_5^5 را بدست آورید؟

۳- در مولکول SO_3 ، Γ_σ را بدست آورید؟

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$		
A'_1	1	1	1	1	1	1	R_z (x, y)	$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	1	1	-1	1	1	1-		
E'	2	1-	0	2	-1	0		$(x^2 - y^2, 2xy)$
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1	z	
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1		
E''	2	-1	0	2-	1	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

۴- شکل نهایی را بعد از انجام اعمال تقارنی زیر بدست آورید؟

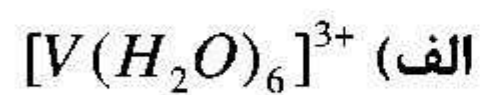
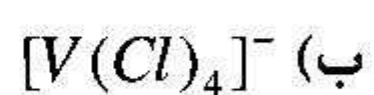


۵- اربیتالهای d_{yz}, P_z در گروه نقطه ی D_{2h} بترتیب از راست به چپ در کدام نمایشگرها ظاهر می شوند؟

D_{2h}	E	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	i	$\sigma(xy)$	$\sigma_{(xz)}$	$\sigma_{(yz)}$
A_g	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
B_{1g}	+1	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1
B_{2g}	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1
B_{3g}	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1
A_u	+1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-1
B_{1u}	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1
B_{2u}	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1
B_{3u}	+1	-1	-1	+1	-1	+1	+1	-1

۶- جدول مشخصات برای گروه نقطه ی C_{2v} را بدست آورید؟

۷- انتقالات الکترونی برای کمپلکسهای زیر را بدست آورید؟



١.٧١ نمبر

C_{2v} (ج) Cs (ب) C_{2h} (الف) -١

١.٧١ نمبر

C_5^4 -٢

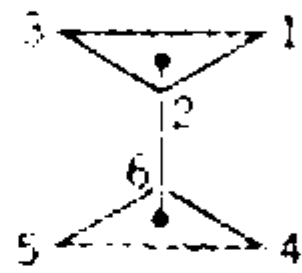
σ_h

١.٧١ نمبر

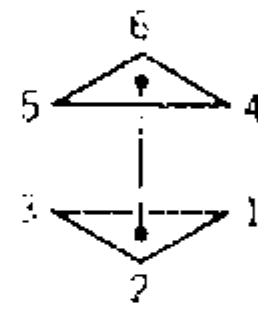
$A'_1 + E'$ -٣

١.٧١ نمبر

(الف) -٤



(ب)



١.٧١ نمبر

B_3g, B_1u -٥

١.٧١ نمبر

-٦

١.٧٤ نمبر

${}^3T_1g(F) \rightarrow {}^3T_1g(P)$ ${}^3T_1g \rightarrow {}^3A_2g$ ${}^3T_1g \rightarrow {}^3T_2g$ (الف) -٧

${}^3A_2 \rightarrow {}^3T_1(P)$ ${}^3A_2 \rightarrow {}^3T_1(F)$ ${}^3A_2 \rightarrow {}^3T_2$ (ب)

نمر ۱.۷۱

۱- عناصر و اعمال تقارن و مرتبه گروه و گروه نقطه ای مولکول CCl_4 را معین کنید؟

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)

نمر ۱.۷۱

۲- اوربیتال های مولکولی π را در رادیکال آلیل با استفاده از توابع SALC به دست آورید؟

C_{2v}	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

نمر ۱.۷۱

۳- چگونگی توزیع الکترون ها در اوربیتال های d را در یک کمپلکس هشت وجهی برای d^7, d^6, d^5, d^4 در میدان های ضعیف و قوی را معین کنید؟

نمر ۱.۷۱

۴- در مولکول AB_3 هرمی تقارن شیوه های ارتعاشی نرمال را به دست آورید و کدامیک در IR فعال هستند؟

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

نمر ۱.۷۱

۵- در کمپلکس $[V(H_2O)_6]^{3+}$ تعداد و نوع انتقالات مجاز را مشخص کنید؟

نمر ۱.۷۱

۶- با استفاده از ماتریس های تبدیل نشان دهید که عمل تقارن S_2 با عمل تقارن i برابر است؟

نمر ۱.۷۴

۷- دستورهای گزینش بر مبنای تقارن برای واکنش های حلقه ساز را با ذکر یک مثال توضیح دهید؟