

# 中原大學 100 學年度 碩士班 入學考試

3 月 19 日 15:30~17:00 化學系

誠實是我們珍視的美德，  
我們喜愛「拒絕作弊，堅守正直」的你！  
(共 3 頁 第 1 頁)

科目：無機化學

可使用計算機，惟僅限不具可程式及多重記憶者

不可使用計算機

1. Define and compare the following terms: (20 points)

- (a) Oxidative addition and reductive elimination
- (b) Dissociative and associative mechanisms
- (c) Trans effect and trans influence
- (d) P-type and N-type semiconductors

2. A molecule has the symmetry of  $C_{4v}$ . (20 points)

- (a) Give the symmetry operations for this point group.
- (b) Write down the multiplication table for these operations.
- (c) Arrange these operations into classes by similarity transformations.
- (d) Construct the character table and name each irreducible representations.
- (e) Place  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ,  $R_x$ ,  $R_y$  and  $R_z$  into suitable positions.

3. Derive the molecular orbital diagram for the  $NH_3$  molecule which has a  $C_{3v}$  symmetry and give the wavefunction for each of the energy levels. Which levels are the HOMO and LUMO ? (20 points)

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

# 中原大學 100 學年度 碩士班 入學考試

3 月 19 日 15:30~17:00 化學系

誠實是我們珍視的美德，  
我們喜愛「拒絕作弊，堅守正直」的你！  
(共 3 頁 第 2 頁)

科目：無機化學

可使用計算機，惟僅限不具可程式及多重記憶者

不可使用計算機

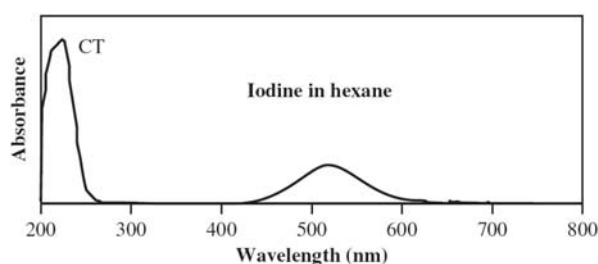
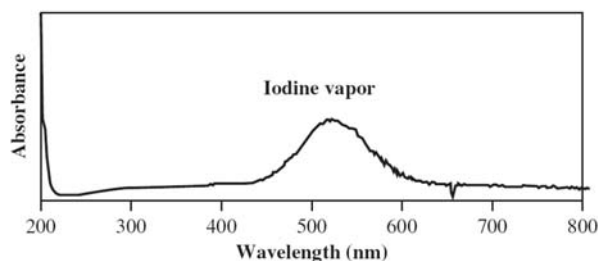
4. Draw the molecular orbital diagram for the octahedral  $ML_6$  complex. (20 points)

(a) Consider only  $\sigma$  interaction

(b) Discuss the effect of  $\pi$  donor and  $\pi$  acceptor on the energy levels.

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

5. The spectra of  $I_2$  with different bases are shown below. Explain the differences. Using the molecular orbital diagram, define  $I_2$  transition, donor-acceptor transition and charge transfer transition. (20 points)



# 中原大學 100 學年度 碩士班 入學考試

3 月 19 日 15:30~17:00 化學系

誠實是我們珍視的美德，  
我們喜愛「拒絕作弊，堅守正直」的你！  
(共 3 頁第 3 頁)

科目：無機化學

可使用計算機，惟僅限不具可程式及多重記憶者

不可使用計算機

