

3.2 CO 和 CO₂ 都是直线型分子，试写出这两个分子各自的对称元素。

解：

CO:

对称元素：对称轴(C_∞)、对称面(∞ 个 σ_v)

CO₂(O=C=O)

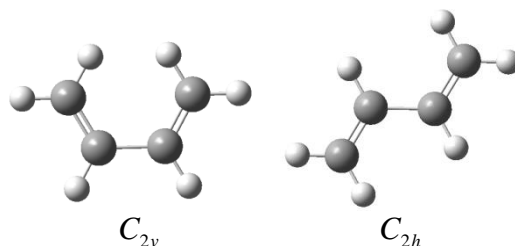
对称元素：对称轴(C_∞ , ∞ 个 C_2)、对称面(∞ 个 σ_v , σ_h)、对称心(i)、映转轴(S_∞)

3.3 分别写出顺式和反式丁二烯分子的对称元素。

解：

①顺式丁二烯：对称轴(C_2)、对称面(2个 σ_v)

②反式丁二烯：对称轴(C_2)、对称面(σ_h)、对称心(i)



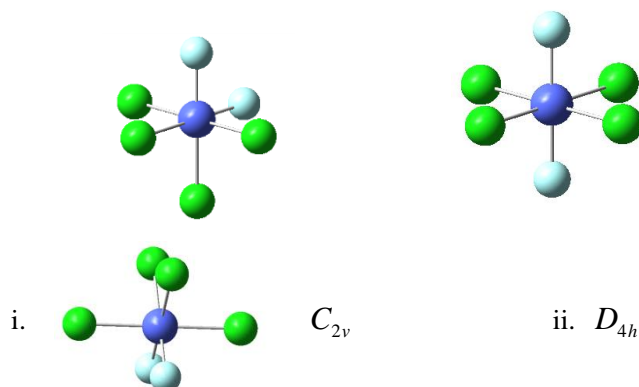
3.5 H₂O 属 C_{2v} 点群，有 4 个对称元素：E、 C_2 、 σ_v 、 σ'_v ，试写出 C_{2v} 点群的乘法表。

解： C_{2v} 点群的乘法表：

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ'_v
E	E	C_2	σ_v	σ'_v
C_2	C_2	E	σ'_v	σ_v
σ_v	σ_v	σ'_v	E	C_2
σ'_v	σ'_v	σ_v	C_2	E

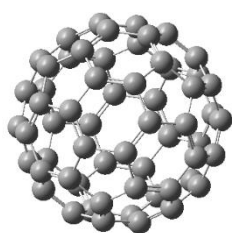
3.16 CoCl₆³⁺ 是八面体构型的分子，假设两个配位为 F 原子取代，形成 CoCl₄F₂ 分子，可能属于什么对称点群？

解：

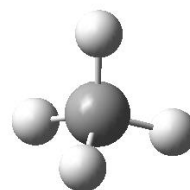
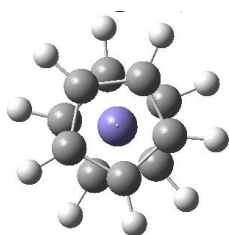


3.19 找出下列分子对称性最高的点群及其可能的子群：

① C_{60}



交错型



解：

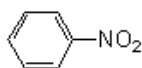
① C_{60} 点群： I_h ；子群： $D_{5d}, D_5, C_{5v}, C_5, D_{3h}, D_3, C_{3v}, C_3$ 等

② 二茂铁（交错型）点群： D_{5d} ；子群： D_5, C_{5v}, C_5 等

③ 甲烷 点群： T_d ；子群： D_{2d}, D_2, C_{3v}, C_3 等

3.22 指出下列分子所属的点群，并判断其有无偶极矩、旋光性

①

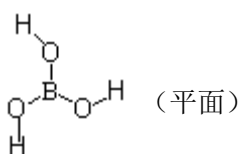


② IF_5

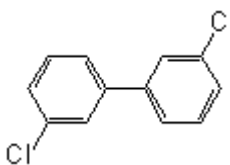
③ 环己烷（船式和椅式）

④ SO_4^{2-} （四面体）

⑤

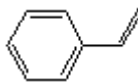


⑥



⑦ $XeOF_4$ （四方锥）

⑧



解：

序号	分子	点群	偶极矩	旋光性	
①		C_{2v}	有	无	
②	IF_5	C_{4v}	有	无	
③	环己烷	船式	C_{2v}	有	无
		椅式	D_{3d}	无	无
④	SO_4^{2-}	T_d	无	无	
⑤		C_{3h}	无	无	
⑥		C_{2h}	无	无	
⑦	$XeOF_4$ (四方锥)	C_{4v}	有	无	
⑧		C_s	有	无	