

Problem of the Week

PROBLEM 1A.

Properties of 1,3-butadiene.

1,3-butadiene($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$) is an important compound which initiates synthesis of rubber. Answer the following questions.

(1) Draw the Lewis formula of 1,3-butadiene. According to the Lewis formula, what is the (classical) bond order and (approximate) bond angle of each C-C bond and C-H bond?

(2) Use the VB model and LCAO-MO model together. Figure out the linear combination of AO(atomic orbitals) to form π -MO(molecular orbital)s of butadiene. By using the correlation diagram of π -electrons, predict the bond order in 1,3-butadiene. Does the conclusion in problem (1) fit with the conclusion of problem (2)? If not, describe why two models results in different conclusions.

* Must include (partial) terms of LCAO-MO notation.



(3) The two hydrogen atoms that is bonded at the C2 and C3 atom, can either exist in cis-configuration or trans-configuration. Does two geometrical isomers result in different structures and energy levels? Expect and explain why.

Problem of the Week

PROBLEM 1A.

Properties of 1,3-butadiene.

1,3-butadiene($\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$)은 고무를 합성하는 선구 물질 중 하나로 유용하게 사용된다. 물음에 답하시오.

(1) 1,3-butadiene의 루이스 구조식을 그리시오. 루이스 구조식을 생각할 때, (고전적) 결합 차수와 (대략적인) C-C 결합, C-H 결합 각각의 결합각을 구하시오.

(2) VB 이론과 MO 이론을 동시에 사용해 보자. π -전자계에 대한 MO(분자궤도함수)를 구성하기 위해 AO(원자궤도함수)를 어떻게 선형 조합해야 하는지 기술하시오. π -전자에 대한 MO 상관 도표를 사용하여 1,3-butadiene에서 결합 차수를 예측하시오. 문제에서의 결론이 문제 (1)과 상응하는가? 그렇지 않다면 두 모델에 차이가 나타나는 이유를 설명하시오.

* 문제풀이의 과정에 반드시 π -전자의 분자 궤도함수에 대한 에너지 도표를 포함하라.



(3) C_2 와 C_3 원자에 붙어 있는 수소는 cis-형태와 trans-형태로 존재할 수 있다. 이로부터 형성되는 2개의 기하 이성질체는 다른 구조와 다른 에너지(준위)를 갖는가? 이를 예측하고 논리적으로 설명하시오.