

以下の設問に答えなさい。

問題 1. 次の 4 つの分子の構造について VSEPR モデルを用いて考察しなさい。

- 1) まずその基本的な構造を図示しなさい。
- 2) 上の基本構造がどの点群に属するかを述べなさい。
- 3) 次に、孤立電子対と結合電子対を考慮してその基本的な構造からどのように歪むかについて述べなさい。

- (a)  $\text{ClF}_3$  (中心原子 : Cl)
- (b)  $\text{SF}_4$  (中心原子 : S)
- (c)  $\text{XeF}_4$  (中心原子 : Xe)
- (d)  $\text{BrF}_5$  (中心原子 : Br)

†

問題 2. (存在し難い分子であるが)  $\text{BH}$  (電気陰性度  $\chi_{\text{P}}(\text{H}) = 2.20, \chi_{\text{P}}(\text{B}) = 2.04$ ) について次の問い合わせに答えなさい。

- 1) H の 1s 軌道と B の 2s, 2p 軌道からできる分子軌道のエネルギーダイアグラムを図示しなさい。
- 2) 結合次数を答えなさい。
- 3) この分子に 2 個の電子を加えた  $\text{BH}^{2-}$  イオンの磁性 (反磁性、常磁性など) について、考察しなさい。

問題 3. 平面三角形の  $\text{EH}_3$  (E は B-Fまでの 2p 元素) と三角錐型の  $\text{EH}_3$  について、H の 1s 軌道と E の 2s, 2p 軌道からできる分子軌道のエネルギーダイアグラムを図示し、さらにその 2 つの構造間の Walsh ダイアグラムを描きなさい。

問題 4. 六配位八面体形の金属錯イオン  $[\text{CoBrCl}(\text{NH}_3)_4]^+$  および錯体  $[\text{CoCl}_3(\text{NH}_3)]$  について、全ての異性体の構造をスケッチし、その構造が属する点群を答えなさい ( $\text{NH}_3$  は自由回転し、水素の位置は考慮しないものとする)。

問題 5. 右図 1 に示した正四面体(tetrahedral)の  $[\text{Ni}(\text{CO})_4]$  の赤外活性およびラマン活性な CO 伸縮振動について答えなさい。

- 1) 以下に示した手順にしたがって、赤外活性およびラマン活性な CO 伸縮振動の数を求めなさい。

i) この分子の属する点群を決める。

ii) 指標表 (別紙 p4 参照) から対称操作を全て抜き出す。それぞれの対称操作を行なったとき、4 つの CO のうち位置が変わらないものは 1、変わるもののは 0 として足し合わせる。

iii) 結果に合う既約表現の組み合わせを決める。

iv) 指標表において  $x, y, z$  のある既約表現をもとに赤外活性な CO 伸縮振動の数を求める。また、 $x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz$  のある既約表現をもとにラマン活性な CO 伸縮振動の数を求める

- 2) それぞれの赤外活性、ラマン活性な伸縮振動の動きを例にならい、図 2 に示しなさい (既約表現の記号を付記しなさい)。

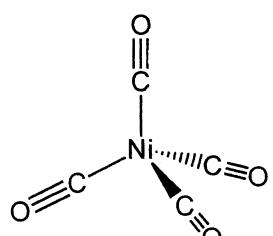


図 1

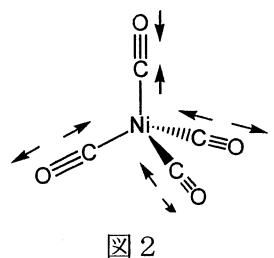


図 2

問題 6. 身につけるもので、対称性の高い形をしているものを 2 つ挙げ、それぞれをスケッチし、それに対称要素を書き込むとともに、属する点群が何かを答えなさい (点群の異なるものを挙げなさい)。