

学籍番号() 名前()

以下の問題に答えよ。

- (1) ある有機化合物を再結晶するために、クロロホルム溶液を冷却したところ粉状の化合物が析出してきた。 $\times$ 線結晶構造解析に適した単結晶を得るために、あなたは次の一手としてどのような方法で再結晶を行えば良いか？

- (2) ある論文に次の結晶構造解析データが記されていた。

compound	1	2	3	4
formula	$C_{35}H_{53}BF_2N_2$	$C_{35}H_{53}BFN_2$	$C_{76}H_{110}B_2F_2N_4O_2$	$C_{42}H_{58}BFN_2O_2$
cryst syst	<i>Monoclinic</i>	<i>Orthorhombic</i>	<i>Monoclinic</i>	<i>Monoclinic</i>
space group	$P2_1/n$	$Pbca$	$P2_1/n$	$C2/c$
a, (Å)	8.334(4)	10.724(4)	16.741(4)	23.803(6)
b, (Å)	15.431(7)	20.898(8)	9.664(2)	24.237(5)
c, (Å)	23.614(10)	28.226(11)	22.416(5)	16.560(4)
β , ($^\circ$)	98.9292(15)	90	104.580(7)	125.035(3)
volume, (Å ³)	3194(2)	6326(4)	3509.9(15)	7823(3)
Z	4	8	2	8
GOF on F^2	1.151	1.295	1.073	1.050
R_1, wR_2 [$ I > 2\sigma(I)$]	0.0571, 0.1232	0.0949, 0.1745	0.0599, 0.1369	0.0605, 0.1629
R_1, wR_2 (all data)	0.0710, 0.1306	0.1112, 0.1811	0.0983, 0.1622	0.0941, 0.1827

- (a) 最も良いデータはどの化合物のものか？
 (b) 単位格子のパラメータのうち、角度が 1 つしか示されていないのは何故か？
 (c) それぞれの化合物において、[単位格子の体積]を[単位格子中の非対称単位数 Z]と[組成式中の水素以外の原子数]で割るといくつになるか計算せよ。また、その数字が意味するところを推定せよ。

提出方法：この用紙に解答後、スキャンまたは写真撮影して PDF ファイルに変換、右 QR コードから提出してください(スマホなら **CamScanner** というアプリがおすすめ)。リンクは山下研ウェブサイトのトップページにも作成しておきますので PC からの人はそちらを利用しても OK です。なお、Google ドライブの容量がいっぱいになっていると提出できないようです。その場合はファイルを削除して容量を確保するか別の Google アカウントを使いましょう。

