

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。X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) ある論文中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 ₂ N ₂	C ₃₅ H ₅₃ BFN ₂	C ₇₆ H ₁₁₀ B ₂ F ₂ N ₄ O ₂	C ₄₂ H ₅₈ BFN ₂ O ₂
cryst syst	<i>Monoclinic</i>	<i>Orthorhombic</i>	<i>Monoclinic</i>	<i>Monoclinic</i>
space group	<i>P2₁/n</i>	<i>Pbca</i>	<i>P2₁/n</i>	<i>C2/c</i>
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, (°)	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 > 2σ(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。

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。X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) ある論文中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 ₂ N ₂	C ₃₅ H ₅₃ BFN ₂	C ₇₆ H ₁₁₀ B ₂ F ₂ N ₄ O ₂	C ₄₂ H ₅₈ BFN ₂ O ₂
cryst syst	<i>Monoclinic</i>	<i>Orthorhombic</i>	<i>Monoclinic</i>	<i>Monoclinic</i>
space group	<i>P2₁/n</i>	<i>Pbca</i>	<i>P2₁/n</i>	<i>C2/c</i>
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, (°)	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 > 2σ(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。