

12月4日 学習相談実施報告

来室者 5回生 男子1名

質問内容

無機化合物の対称性について。点群、対称要素、点群の帰属など、過去の定期試験の問題について教えて欲しい。指標表の見方は全くわからない。

回答内容

試験問題を見ると、複数の無機化合物について、(1)ルイスの電子構造式表記、(2)VSEPRの法則に基づく化合物の立体構造決定、(3)点群の帰属となっていたので、(1)は理解しているとして、(2)、(3)について詳しく説明した。

(2)VSEPRの法則の表はwebで各種公開されているのでそれを参考にするとよい。実例をwebで見せた。

基本的な考えは、VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion)の言葉の通り、電子対を結合電子対、孤立電子対の二つに分けると、電子反発の順序は i) 孤立電子対-孤立電子対、ii) 孤立電子対-結合電子対、iii) 結合電子対-結合電子対になる。反発が強い程電子対はお互いにより離れた空間配置をとろうとするので、それを可能にする立体構造になる。MITOCWの化学の講義でVSEPRについて説明している場面をインターネットで学生に見せて、VSEPRは大切だから必ず理解して使えるように、と言った。

(3)点群について

「空間的な対称操作に対して、少なくとも空間の一点は不変である対称操作の集まりを点群という」と簡単に説明した後、点群の対称要素には1. 回転軸、2. 鏡映面、3. 反転の中心、4. 回映面、の4つがあること。それぞれ1-4の要素について、具体的にはメタンやベンゼンを例に、対称操作の要素である C_2 , C_3 , C_6, \dots, C_n , C_n^m で表わされる回転軸、 S_2 , S_3 , S_6, \dots, S_n , S_n^m で表わされる回映軸、 σ_v , σ_d , σ_h で表わされる鏡映面、恒等操作である E 、について説明。

その後、実際の帰属については

BrF_3 が正三角錐構造をとるとすると C_{3v}

PCL_5 が正三角両錐構造をとるとすると D_{3h} になると回答した。

CO_2 の点群の帰属は今日理解できたことをベースに自分で行うように言った。

(VSEPRによれば BrF_3 の構造はT型構造になるので C_{2v} とするのが正しい。次回訂正しておく。)

帰属が正しいかどうかは、指標表の対称操作の要素と比較して総てが合致しておればよい。

指標表の数値と既約表現については今はわからなくていいと言った。具体的な問題に出会ったときに教えることにした。

以上