

TEST OF CHEMISTRY

Department of Chemistry

化 学 専 攻

December 7, 2006 (平成 18 年 12 月 7 日) 9 : 00 ~ 11 : 00

General Directions (注 意 事 項)

1. Answer all problems in English or in Japanese. (すべての問題に英語または日本語で解答せよ。)
 2. Check the number of sheets. (以下の用紙の枚数を確認せよ。)
- | | |
|-----------------------|-----|
| Problem Sheets (問題用紙) | 3 枚 |
| Answer Sheets (解答用紙) | 3 枚 |

[I] Answer the following problems (i) to (iii). (次の問 (i) ~ (iii) に答えよ。)

(i) When standard deviations of observed quantities A and B are δA and δB , respectively, express those of $A+B$, $A \times B$, and A/B as a function of A , B , δA , and δB . (測定値 A と B の標準偏差がそれぞれ δA と δB であるとき, $A+B$, $A \times B$, A/B の標準偏差を A , B , δA , δB の関数で表せ。)

(ii) Which of NH_3 and H_2O molecules is more basic toward Brønsted acids and Lewis acids? Answer this question, giving the reason(s) for your answer. (NH_3 と H_2O 分子のうちどちらがブレンステッド酸とルイス酸に対して塩基性が強いのか。理由とともに答えよ。)

(iii) Predict qualitative structures of the following four molecules or ions on the basis of the valence shell electron pair repulsion (VSEPR) theory, and draw each of their possible three-dimensional structures schematically. Lone-pair electrons should be located appropriately if they are present. (原子価殻電子対反発 (VSEPR) 則によって, 次の4つの分子またはイオンの定性的な構造を推定し, それぞれの可能な立体構造を図示せよ。孤立電子対 (非共有電子対) があれば, これも図に加えよ。)

(a) ClO_3^- , (b) BrF_3 , (c) XeOF_4 , (d) SF_4

[II] Answer the following problems (a) and (b). (次の問(a)と(b)に答えよ。)

(a) Answer the problems concerning the following molecules. (次の分子に関する問題に答えよ。)



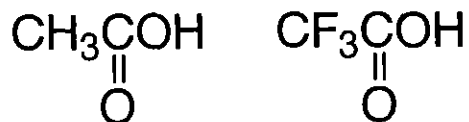
- (i) What point group does each molecule belong to in the ground state? (基底状態において、それぞれの分子が属する点群は何か。)
- (ii) Which of the molecules will absorb or emit light due to rotational energy transitions and explain your answer. (回転遷移に対応する光を吸収または放出できる分子はどれか。理由と共に示せ。)
- (iii) Which of the molecules will absorb or emit light due to vibrational energy transitions and explain your answer. (振動遷移に対応する光を吸収または放出できる分子はどれか。理由と共に示せ。)

(b) Answer the following problems. (次の問題に答えよ。)

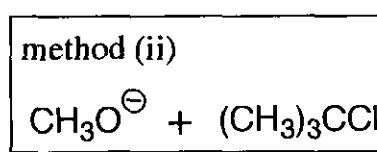
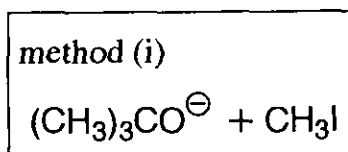
- (i) The rotational energy transition from $J = 3$ to $J = 4$ of HCl is observed at 83.2 cm^{-1} , where J is a rotational quantum number. Determine the rotational constant B (cm^{-1}) from this value. (HCl の $J = 3$ から $J = 4$ への回転遷移は 83.2 cm^{-1} である。ここで、 J は回転量子数である。回転定数 B (cm^{-1}) を求めよ。)
- (ii) The vibrational wavenumber of H₂ is $4.2 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$. Predict that of D₂ from this value, where an atomic weight is 1.0 for H and 2.0 for D, and $\sqrt{2} = 1.4$. (H₂ の振動の波数は $4.2 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$ である。D₂ の振動の波数を予測せよ。ここで、H の原子量は、1.0、D の原子量は 2.0 で、 $\sqrt{2} = 1.4$ とする。)

[III] Answer the following problems (a) and (b). (次の問(a)と(b)に答えよ)。

- (a) Which of the following two carboxylic acids do you expect to be more acidic? Explain your answer. (次の2つのカルボン酸のうち、より酸性度が大きいのはどちらか。また、理由も説明せよ。)



- (b) Which of the following two methods (i) and (ii) do you expect to be more useful for preparation of $(\text{CH}_3)_3\text{COCH}_3$? Explain your answer. (次の2つの方法 (i) と (ii) のうち、 $(\text{CH}_3)_3\text{COCH}_3$ の合成により有効なのはどちらか。また、理由も説明せよ。)



- (c) Give the structures (and stereochemistry, if necessary) of the major organic products (1, 2) expected in each of the following reactions. Propose each mechanism with an arrow formalism (\curvearrowright). (次の反応における主生成物 (有機化合物 1, 2) の構造を (必要があれば立体化学も) 記せ。その際、反応機構を電子の動きがわかるように矢印 (\curvearrowright) で図示せよ。)

