

Preparatory Problems IChO 2012

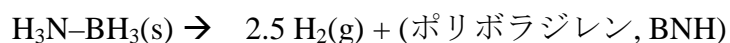
Theoretical Problems



問題 4. 窒化ホウ素とその固体構造

ホウ素—窒素の化学は、B—N結合がC—C結合と等電子的であることから注目されている。そのうえ、炭素の半径とその電気陰性度は、おおよそホウ素Bと窒素Nの平均値になっている。(訳者注：ここで「半径」は、おおむね「共有結合半径」を意味している。)

最も単純なホウ素と窒素からなる化合物の一つにアンモニアとボランの付加化合物である $\text{H}_3\text{N}-\text{BH}_3$ がある。この化合物は熱分解により H_2 ガスとポリボラジレン(polyborazylene)を生成する。

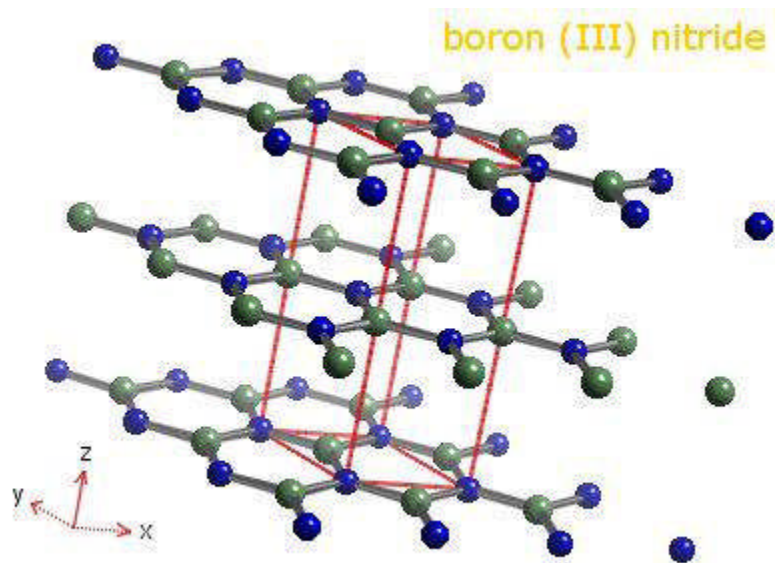


(BNHから $\text{H}_3\text{N}-\text{BH}_3$ を再生成させる効率的で低コストの方法を見つかることができれば、燃料電池駆動の応用機器での水素発生物質として利用可能である。) さらに加熱することでポリボラジレンは窒化ホウ素BN(boron nitride)になる。

窒化ホウ素にはいくつかの結晶形が存在するが、最も一般的な多形はグラファイト類似構造である。その他に、そのグラファイト類似結晶を加圧下で加熱して得られる閃亜鉛鉱型のZnSと同様の構造を有する多形が存在する。窒化ホウ素は熱的および化学的に安定で、高温セラミックス材料として使用される。ごく最近、グラファイト類似構造を有する六方晶BNの層間をグラフェンシートで結合した新素材が合成された。

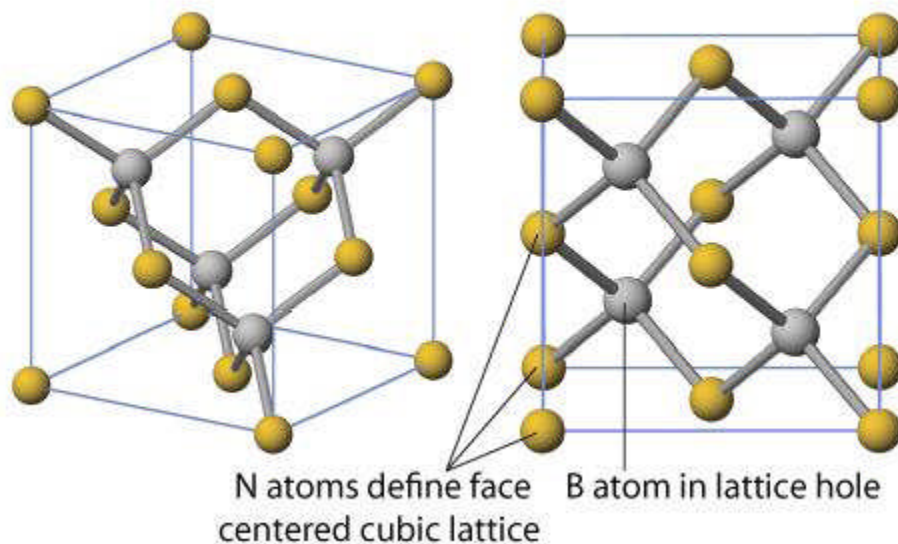
(訳者注：「多形」とは、同じ組成の化合物が異なる結晶形をもつこと、ないしはその結晶形のそれぞれのことをいう。「六方晶」とは、六回回転軸をもつ結晶形をいう。)

- a) 六方晶の窒化ホウ素の部分構造を下図に示す。グラファイト構造と比べた時の類似点と相違点を述べよ。



図の説明：窒化ホウ素（ホウ素の価数は3価）

b) 下図に示したZnS類似構造を有するBNは、窒素原子の形成する面心立方格子の四面体型の隙間位置の半分をホウ素原子が占める構造である。この構造のBNの密度が 3.45 g/cm^3 であるとする、B-Nの結合距離はいくらか。（別表にて、アボガドロ数、 $N_A = 6.0221 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ が、周期律表において各原子の原子量がそれぞれ与えられている。B=10.81, N=14.01）



図の説明：N 原子は面心立方格子を形成。B 原子は格子内の隙間に位置。