

物理定数および公式集

アボガドロ数, $N_A = 6.0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

ボルツマン定数, $k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$

気体定数, $R = 8.3145 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 0.08205 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

光速, $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

プランク定数, $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ J s}$

ファラデー定数, $F = 9.6485 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$

電子の質量, $m_e = 9.10938215 \times 10^{-31} \text{ kg}$

標準圧力, $P = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$

大気圧, $P_{atm} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa} = 760 \text{ mmHg} = 760 \text{ torr}$

セルシウス温度における $0^\circ\text{C} = 273.15 \text{ K}$

1 pm(ピコメートル) = 10^{-12} m ; $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$; 1 nm(ナノメートル) = 10^{-9} m

1 eV = $1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$

1 cal = 4.184 J

1 amu (原子質量定数) = $1.66053904 \times 10^{-27} \text{ kg}$

電気素量: $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$

理想気体の状態方程式: $PV = nRT$

エンタルピー: $H = U + PV$

ギブスの自由エネルギー: $G = H - TS$

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln Q$$

$$\Delta G^0 = -RT \ln K = -nFE_{cell}^0$$

エントロピー変化:

$$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T}, \text{ ただし } q_{rev} \text{ は可逆過程での熱量}$$

$$\Delta S = nR \ln \frac{V_2}{V_1} \text{ (理想気体の等温膨張において)}$$

ネルンストの式: $E = E^0 + \frac{RT}{nF} \ln \frac{C_{ox}}{C_{red}}$

光子のエネルギー: $E = \frac{hc}{\lambda}$

積分形速度式

0 次: $[A] = [A]_0 - kt$ # #

1 次: $\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$

2 次: $\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$

アレニウスの式: $k = Ae^{-E_a/RT}$

1 次校正曲線の式: $y = mx + n$

標準偏差:

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{x=1}^N (x_1 - \bar{x})^2}{N - 1}}$$

ランベルト・ベールの式: $A = \epsilon lc$

周期表

1																	18	
1 H 1.008	2		原子番号 元素記号 原子量										13	14	15	16	17	2 He 4.003
3 Li 6.94	4 Be 9.01											5 B 10.81	6 C 12.01	7 N 14.01	8 O 16.00	9 F 19.00	10 Ne 20.18	
11 Na 22.99	12 Mg 24.31	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13 Al 26.98	14 Si 28.09	15 P 30.97	16 S 32.06	17 Cl 35.45	18 Ar 39.95	
19 K 39.10	20 Ca 40.08	21 Sc 44.96	22 Ti 47.87	23 V 50.94	24 Cr 52.00	25 Mn 54.94	26 Fe 55.85	27 Co 58.93	28 Ni 58.69	29 Cu 63.55	30 Zn 65.38	31 Ga 69.72	32 Ge 72.63	33 As 74.92	34 Se 78.97	35 Br 79.90	36 Kr 83.80	
37 Rb 85.47	38 Sr 87.62	39 Y 88.91	40 Zr 91.22	41 Nb 92.91	42 Mo 95.95	43 Tc -	44 Ru 101.1	45 Rh 102.9	46 Pd 106.4	47 Ag 107.9	48 Cd 112.4	49 In 114.8	50 Sn 118.7	51 Sb 121.8	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.3	
55 Cs 132.9	56 Ba 137.3	57-71	72 Hf 178.5	73 Ta 180.9	74 W 183.8	75 Re 186.2	76 Os 190.2	77 Ir 192.2	78 Pt 195.1	79 Au 197.0	80 Hg 200.6	81 Tl 204.4	82 Pb 207.2	83 Bi 209.0	84 Po -	85 At -	86 Rn -	
87 Fr -	88 Ra -	89-103	104 Rf -	105 Db -	106 Sg -	107 Bh -	108 Hs -	109 Mt -	110 Ds -	111 Rg -	112 Cn -	113 Nh -	114 Fl -	115 Mc -	116 Lv -	117 Ts -	118 Og -	

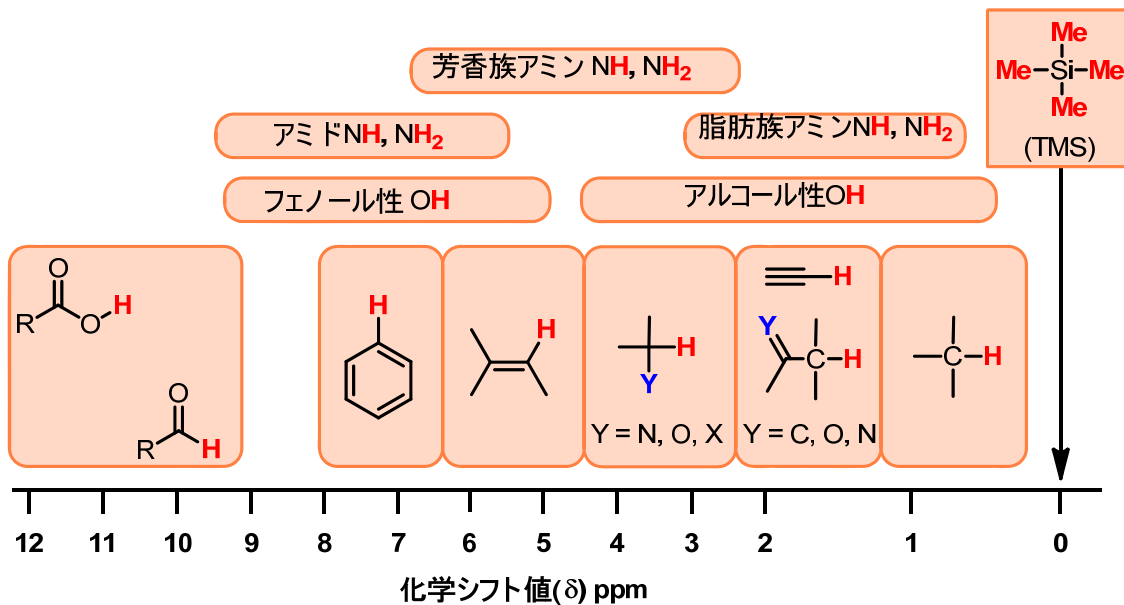
57 La 138.9	58 Ce 140.1	59 Pr 140.9	60 Nd 144.2	61 Pm -	62 Sm 150.4	63 Eu 152.0	64 Gd 157.3	65 Tb 158.9	66 Dy 162.5	67 Ho 164.9	68 Er 167.3	69 Tm 168.9	70 Yb 173.0	71 Lu 175.0
89 Ac -	90 Th 232.0	91 Pa 231.0	92 U 238.0	93 Np -	94 Pu -	95 Am -	96 Cm -	97 Bk -	98 Cf -	99 Es -	100 Fm -	101 Md -	102 No -	103 Lr -



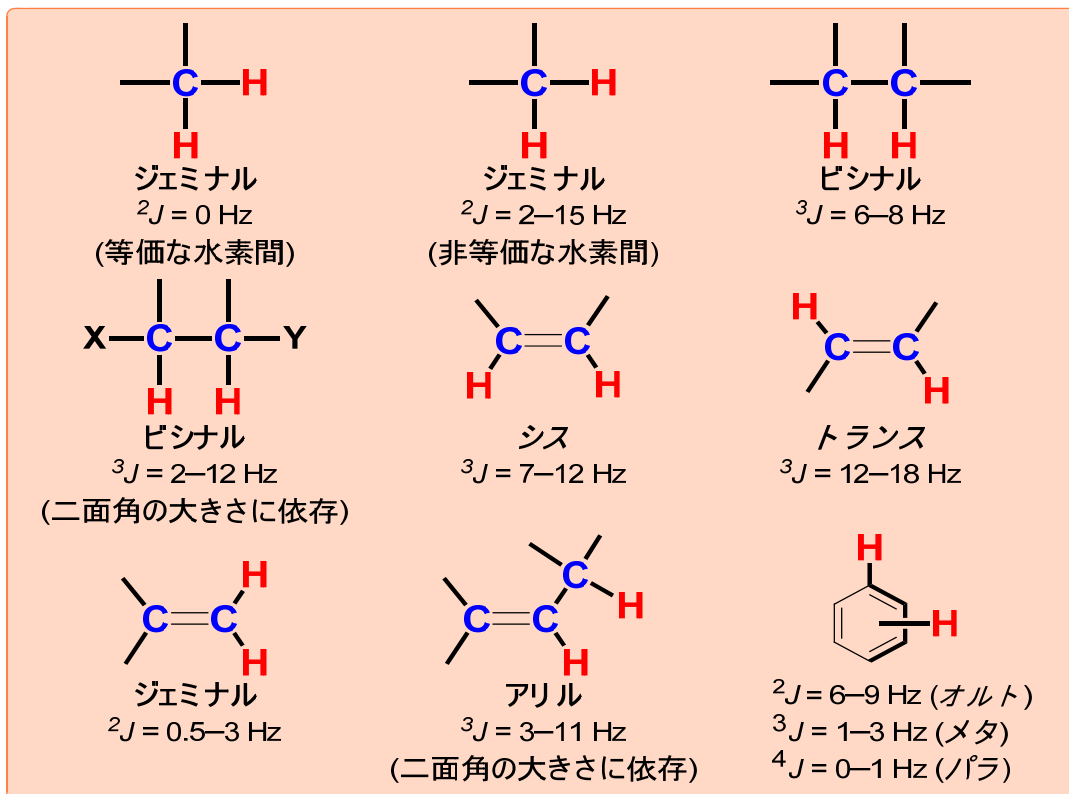
Copyright © 2018 International Union of Pure and Applied Chemistry

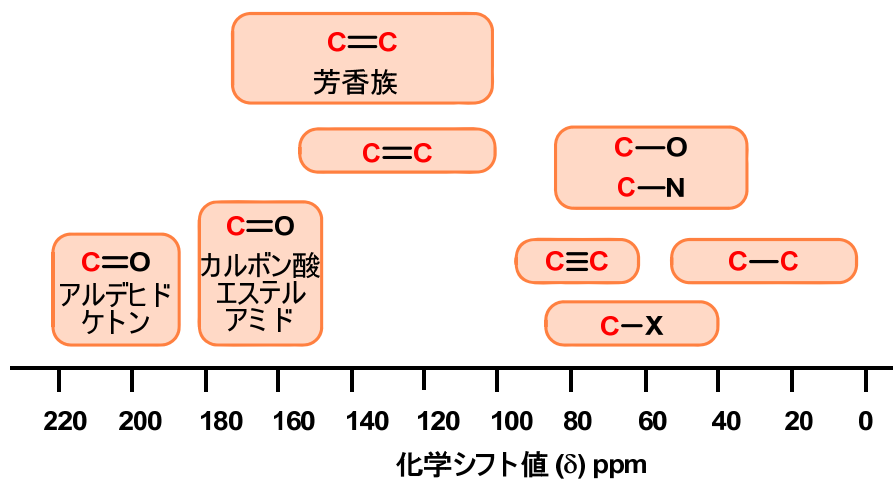
Reproduced by permission of the International Union of Pure and Applied Chemistry

¹H NMR 化学シフト値



代表的なカップリング定数



¹³C NMR 化学シフト値

IR 特定吸収帯の一覧表

官能基	振動形式	波数領域 (cm ⁻¹)	強度
アルコール			
O-H	(伸縮振動, 水素結合あり)	3600–3200	強, ブロード
	(伸縮振動, 水素結合なし)	3700–3500	強, シャープ
C-O	(伸縮振動)	1150–1050	強
アルカン			
C-H	伸縮振動	3000–2850	強
	変角振動	1480–1350	変化する
アルケン			
=C-H	伸縮振動	3100–3010	中程度
	変角振動	1000–675	強
C=C	伸縮振動	1680–1620	変化する
ハロゲン化物			
C-F	伸縮振動	1400–1000	強
C-Cl	伸縮振動	800–600	強
C-Br	伸縮振動	600–500	強
C-I	伸縮振動	500	強
アルキン			
C-H	伸縮振動	3300	強, シャープ
C≡C	伸縮振動	2260–2100	変化する。対称アルキンでは観測されない
アミン			

N-H	伸縮振動	3500-3300	中程度 (1級アミンは2本観測、2級アミンは1本観測。とても弱いときあり)
C-N	伸縮振動	1360-1080	中程度~弱
N-H	変角振動	1600	中程度
芳香環			
C-H	伸縮振動	3100-3000	中程度
C=C	伸縮振動	1600-1400	中程度~弱、複数ピーク観測
カルボニル基 (全般)			
C=O	伸縮振動	1820-1670	強
カルボン酸			
C=O	伸縮振動	1725-1700	強
O-H	伸縮振動	3300-2500	強,大きくブロード
C-O	伸縮振動	1320-1210	強
アルデヒド			
C=O	伸縮振動	1740-1720	強
C-H	伸縮振動	2850-2820 & 2750-2720	中程度、2本観測
アミド			
C=O	伸縮振動	1690-1640	強
N-H	伸縮振動	3500-3100	無置換体は2本のピーク観測
	変角振動	1640-1550	
酸無水物			
C=O	伸縮振動	1830-1800 & 1775-1740	2本観測
エステル			
C=O	伸縮振動	1750-1735	強
C-O	伸縮振動	1300-1000	2本以上観測
ケトン			
鎖状ケトン	伸縮振動	1725-1705	強
環状ケトン	伸縮振動	3員環- 1850	強
	伸縮振動	4員環- 1780	強
	伸縮振動	5員環- 1745	強
	伸縮振動	6員環- 1715	強
	伸縮振動	7員環- 1705	強
α,β -不飽和ケトン	伸縮振動	1685-1665	強
共役構造により吸収ピークは低波数シフトする			
芳香族ケトン	伸縮振動	1700-1680	強
エーテル			
C-O	伸縮振動	1300-1000 (1150-1070)	強
ニトリル			
C \equiv N	伸縮振動	2260-2210	中程度
ニトロ化合物			
N-O	伸縮振動	1560-1515 & 1385-1345	強, 2本観測

発展学習範囲

理論問題

1. ペリ環状反応 (付加環化反応・電子環状反応)
2. sp^2 炭素上での求核置換反応
3. 分光学: ^1H および ^{13}C NMR 分光法の基本 (化学シフト値, 多重度, 積分比, カップリング定数) および IR 分光法の基本
4. 反応速度論: 速度定数モデル・速度論的同位体効果
5. 基礎的な量子化学: 電子エネルギー準位, 共役系での電子遷移, 分子の振動および回転, 単純な共役系の理論
6. 無機化学: 配位化学 (結晶構造, 結晶場理論, 異性化), 同核/異核二原子分子の分子軌道エネルギー図

注意:

- i) 以下の内容は、試験において出題されない。
- 金属触媒を用いるクロスカップリング反応およびオレフィンメタセシス反応
 - マイクロソフト社のエクセルや同様の表計算ソフトの使用
 - 微分・積分の使用
 - 生体分子に関する問題を準備問題で少し出題しているが、生化学や糖の化学を発展学習の内容として網羅するする必要はない
 - 無機反応の反応機構
 - 多原子分子の分子軌道エネルギー図
- ii) 重要なものでなければ、溶媒や反応温度のような反応条件は、反応スキームの矢印のところに記載しない。

実験問題

1. 分光測定器の使用 (1 波長/2 波長での測定)
2. 有機合成の基礎的技術: 再結晶, 薄層クロマトグラフィー(TLC), ろ過, ろ過後の析出物の乾燥を含む一連の操作
3. 蒸留と抽出

注意:

実験試験において、以下は出題されない。

- ⇒ 融点測定
- ⇒ ロータリーエバポレーターの使用
- ⇒ 水に不安定な化合物の操作・後処理 (シリンジや風船の使用)
- ⇒ カラムクロマトグラフィーの使用
- ⇒ 実験中重合によるヒドロゲルの作製

