

第 49 回国際化学オリンピック大会・理論問題

情報冊子

タイ ナコーンパトム

“化学で世界をつなげよう”



物理定数および公式集

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

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

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

光の速さ $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

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

ファラデー定数 $F = 9.64853399 \times 10^4 \text{ C}$

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

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

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

摂氏温度の 0 度 273.15 K

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

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

$1 \text{ amu} = 1.66053904 \times 10^{-27} \text{ kg}$

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: $G = H - TS$ $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$

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

エントロピー変化: $\Delta S = \frac{q_{\text{rev}}}{T}$ (q_{rev} : 可逆的に移動させた熱エネルギー)

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

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

光子のエネルギー: $E = \frac{hc}{\lambda}$

ランベルト-ベールの法則: $A = \log \frac{I_0}{I} = \epsilon b C$

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

$$k = Ae^{-E_a/RT} \quad (A \text{ は頻度因子})$$

元素の周期表

		18		8A																	
		2		He		4.003															
		10		Ne		20.18															
		17		F		19.00															
		9		O		16.00															
		8		N		14.01															
		7		C		12.01															
		6		B		10.81															
		5		Be		9.012															
		4		Li		6.941															
		12		Mg		24.31															
		3		Na		22.99															
		11		Al		26.98															
		13		Si		28.09															
		14		P		30.97															
		15		S		32.07															
		16		Cl		35.45															
		17		Ar		39.95															
		36		Kr		83.80															
		34		Se		78.97															
		33		As		74.92															
		32		Ge		72.61															
		31		Ga		69.72															
		30		Zn		65.39															
		48		Cd		112.4															
		47		Ag		107.9															
		46		Pd		106.4															
		80		Hg		200.6															
		79		Au		197.0															
		82		Pb		207.2															
		83		Bi		209.0															
		84		Po		(209)															
		85		At		(210)															
		117		Ts		(294)															
		116		Lv		(293)															
		115		Mc		(289)															
		114		Fl		(289)															
		113		Nh		(286)															
		112		Cn		(285)															
		111		Rg		(272)															
		110		Ds		(281)															
		109		Mt		(266)															
		77		Ir		192.2															
		76		Os		190.2															
		75		Re		186.2															
		43		Tc		(98)															
		44		Ru		101.1															
		45		Rh		102.9															
		46		Pd		106.4															
		28		Ni		58.69															
		29		Cu		63.55															
		30		Zn		65.39															
		12		Mg		24.31															
		11		Al		26.98															
		10		Si		28.09															
		9		P		30.97															
		8		S		32.07															
		7		Cl		35.45															
		6		Ar		39.95															
		5		K		39.10															
		4		Ca		40.08															
		3		Sc		44.96															
		21		Y		88.91															
		39		Zr		91.22															
		40		Nb		92.91															
		57		La		138.9															
		56		Ba		137.3															
		87		Fr		(223)															
		88		Ra		(226)															
		89		Ac		(227)															
		104		Rf		(261)															
		105		Db		(262)															
		106		Sg		(263)															
		74		W		183.8															
		73		Ta		180.9															
		72		Hf		178.5															
		71		Lu		175.0															
		70		Yb		173.0															
		69		Tm		168.9															
		68		Er		167.3															
		67		Ho		164.9															
		66		Dy		162.5															
		98		Cf		(251)															
		99		Es		(252)															
		100		Fm		(257)															
		101		Md		(258)															
		102		No		(259)															
		103		Lr		(262)															
		71		Lu		175.0															

¹H NMR スペクトルにおける化学シフト値一覧

¹H NMR 化学シフト値

水素の種類 (R=アルキル基, Ar=アリール基)	化学シフト値 (ppm)	水素の種類 (R=アルキル基, Ar=アリール基)	化学シフト値 (ppm)
(CH ₃) ₄ Si	0 (定義)		
RCH ₃	0.9	RCH=O	9.5-10.1
RCH ₂ R	1.2-1.4	RCOOH	10-13
R ₃ CH	1.4-1.7	RCOCH ₃	2.1-2.3
RCH ₂ I	3.2-3.3	RCOCH ₂ R	2.2-2.6
RCH ₂ Br	3.4-3.5	RCOOCH ₃	3.7-3.9
RCH ₂ Cl	3.6-3.8	RCOOCH ₂ R	4.1-4.7
RCH ₂ F	4.4-4.5	R ₂ C=CRCHR ₂	1.6-2.6
RCH ₂ NH ₂	2.3-2.9	R ₂ C=CH ₂	4.6-5.0
RCH ₂ OH	3.4-4.0	R ₂ C=CHR	5.0-5.7
RCH ₂ OR	3.3-4.0	RC≡CH	2.0-3.0
RCH ₂ CH ₂ OR	1.5-1.6	ArCH ₃	2.2-2.5
R ₂ NH	0.5-5.0	ArCH ₂ R	2.3-2.8
ROH	0.5-6.0	ArH	6.5-8.5

¹³C NMR スペクトルにおける化学シフト値一覧

炭素原子の種類 (R=アルキル基, Ar=アリール基)	化学シフト値 (ppm)	炭素原子の種類 (R=アルキル基, Ar=アリール基)	化学シフト値 (ppm)
RCH ₃	10-25	RC≡CR	65-85
RCH ₂ R	20-35	RCH=CHR	120-140
R ₃ CH	25-35	ArylC	120-140
RCH ₂ COR	35-50	RCOOR	160-180
RCH ₂ Br	25-35	RCONR ₂ (アミド)	165-180
RCH ₂ Cl	40-45	RCOOH	175-185
RCH ₂ NH ₂	30-65	RCHO	190-205
RCH ₂ OH	60-70	RCOR	200-215
RCH ₂ OR	65-70		

IR スペクトルにおける特性基吸収帯

特性基	振動の形式	吸収範囲(cm ⁻¹)	強度
アルコール	s=強い, m=中程度, w=弱い, br=幅広い, sh=鋭い		
O-H	(伸縮振動, 水素結合)	3200-3600	s,br
O-H	(伸縮振動, 自由 OH)	3500-3700	s, sh
C-O	伸縮振動	1050-1150	s
アルカン			
C-H	伸縮振動	2850-3000	s
-C-H	変角振動	1350-1480	不定
アルケン			
=C-H	伸縮振動	3010-3100	m
=C-H	変角振動	675-1000	s
C=C	伸縮振動	1620-1680	不定
ハロゲン化アルキル			
C-F	伸縮振動	1000-1400	s
C-Cl	伸縮振動	600-800	s
C-Br	伸縮振動	500-600	s
C-I	伸縮振動	500	s
アルキン			
C-H	伸縮振動	3300	s,sh
-C≡C-	伸縮振動	2100-2260	不定, ただし対称アルキンでは観測されない
アミン			
N-H	伸縮振動	3300-3500	m, (1級アミンは2山、2級アミンは1山観測され、とても弱いことがある)
C-N	伸縮振動	1080-1360	m~w
N-H	変角振動	1600	m
芳香族化合物			
C-H	伸縮振動	3000-3100	m
C=C	伸縮振動	1400-1600	m~w, 多くのピークが観測
置換ベンゼンの置換パターンを識別するのに、C-H 面外変角振動の吸収帯がよく用いられる			
カルボニル基			
C=O	伸縮振動	1670-1820	s
共役構造をとると吸収帯の低波数シフトが起こる			
エーテル			
C-O	伸縮振動	1000-1300 (1070-1150)	s

ニトリル			
CN	伸縮振動	2210-2260	m
ニトロ基			
N-O	伸縮振動	1515-1560 および 1345-1385	s, 2 山観測される

カルボニル基 (C=O) を含む特性基の吸収帯

特性基	振動の形式	吸収範囲 (cm ⁻¹)	強度
カルボニル基			
C=O	伸縮振動	1670-1820	s
共役構造を取ると吸収帯の低波数シフトが起こる			
カルボン酸			
C=O	伸縮振動	1700-1725	s
O-H	伸縮振動	2500-3300	s, とても幅広い(br)
C-O	伸縮振動	1210-1320	s
アルデヒド			
C=O	伸縮振動	1740-1720	s
=C-H	伸縮振動	2820-2850 および 2720-2750	m, 2 山観測される
アミド			
C=O	伸縮振動	1640-1690	s
N-H	伸縮振動	3100-3500	CONH ₂ では 2 山観測
N-H	変角振動	1550-1640	
カルボン酸無水物			
C=O	伸縮振動	1800-1830 & 1740-1775	2 山
エステル			
C=O	伸縮振動	1735-1750	s
C-O	伸縮振動	1000-1300	2 山以上
ケトン			
鎖状ケトン	伸縮振動	1705-1725	s
環状ケトン	伸縮振動	3 員環 - 1850 4 員環 - 1780 5 員環 - 1745 6 員環 - 1715 7 員環 - 1705	s
α,β-不飽和カルボニル化合物	伸縮振動	1665-1685	s
芳香族ケトン	伸縮振動	1680-1700	s