

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 ピコメートル(pm)	$= 10^{-12} \text{ m}$;
1 Å	$= 10^{-10} \text{ m}$;
1 ナノメートル (nm)	$= 10^{-9} \text{ m}$
1 eV	$= 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$
1 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)
	$\Delta S = nR \ln \frac{V_2}{V_1}$ (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	
	$k = Ae^{-E_a/RT}$ (A は頻度因子)

^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)
$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	0 (定義)		
RCH_3	0.9	$\text{RCH}=\text{O}$	9.5-10.1
RCH_2R	1.2-1.4	RCOOH	10-13
R_3CH	1.4-1.7	RCOCH_3	2.1-2.3
RCH_2I	3.2-3.3	RCOCH_2R	2.2-2.6
RCH_2Br	3.4-3.5	RCOOCH_3	3.7-3.9
RCH_2Cl	3.6-3.8	RCOOCH_2R	4.1-4.7
RCH_2F	4.4-4.5	$\text{R}_2\text{C}=\text{CRCHR}_2$	1.6-2.6
RCH_2NH_2	2.3-2.9	$\text{R}_2\text{C}=\text{CH}_2$	4.6-5.0
RCH_2OH	3.4-4.0	$\text{R}_2\text{C}=\text{CHR}$	5.0-5.7
RCH_2OR	3.3-4.0	$\text{RC}\equiv\text{CH}$	2.0-3.0
$\text{RCH}_2\text{CH}_2\text{OR}$	1.5-1.6	ArCH_3	2.2-2.5
R_2NH	0.5-5.0	ArCH_2R	2.3-2.8
ROH	0.5-6.0	ArH	6.5-8.5

 ^{13}C 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	$\text{RC}\equiv\text{CR}$	65-85
RCH_2R	20-35	$\text{RCH}=\text{CHR}$	120-140
R_3CH	25-35	ArylC	120-140
RCH_2COR	35-50	RCOOR	160-180
RCH_2Br	25-35	RCONR_2 (アミド)	165-180
RCH_2Cl	40-45	RCOOH	175-185
RCH_2NH_2	30-65	RCHO	190-205
RCH_2OH	60-70	RCOR	200-215
RCH_2OR	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