

発展学習の範囲

理論問題

無機化合物の構造と特性

固体状態での構造、単位格子、結晶場理論、格子欠陥の概念

分子の量子力学的振る舞い

分子振動、ポテンシャルエネルギー面の読み方、ボルツマン式に基づくエントロピーの決定

熱力学と速度論

電極電位とギブスの自由エネルギーの関係、吸着等温式

立体化学

縮環した二環性アルカンや三環性アルカンの立体配座、面性不斉、ステレオ選択的反応、立体効果に基づく位置選択性、シクロヘキサン環におけるアキシャル位での攻撃

NMR (^1H , ^{13}C , および多核 NMR)でのシグナルの本数の算出、 ^1H NMR における化学シフト値

反応中間体および反応種

カルベノイド、非ベンゼン系芳香族化合物、有機金属化合物、ヘテロ原子間結合

実験技術

合成技術：吸引ろ集

精製：再結晶、カラムクロマトグラフィー

注意

以下の内容・実験技術に関して準備しておかなくてよい。

理論

Diels-Alder 反応以外のペリ環状反応、軌道対称性の保存、高分子化学、相平衡、表面での触媒反応、分子振動の基準振動、分子軌道法、累積分布関数、スレーター則

実験

ロータリーエバポレーター、真空乾燥、pH メーターを用いる pH 測定

物理定数および公式

物理定数

真空中での光速, $c = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

プランク定数, $h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ J s}$

電気素量, $e = 1.602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$

電子の質量, $m_e = 9.10938370 \times 10^{-31} \text{ kg}$

電気定数(真空の誘電率), $\epsilon_0 = 8.85418781 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$

アボガドロ定数, $N_A = 6.02214076 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

ボルツマン定数, $k_B = 1.380649 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

ファラデー定数, $F = N_A \times e = 9.64853321233100184 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$

気体定数, $R = N_A \times k_B = 8.31446261815324 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

$$= 8.2057366081 \times 10^{-2} \text{ L atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$$

統一原子質量単位, $u = 1 \text{ Da} = 1.66053907 \times 10^{-27} \text{ kg}$

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

大気圧, $p_{\text{atm}} = 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$

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

$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$

$1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$

$1 \text{ eV} = 1.602176634 \times 10^{-19} \text{ J}$

$1 \text{ ppm} = 10^{-6}$

$1 \text{ ppb} = 10^{-9}$

$1 \text{ ppt} = 10^{-12}$

$\pi = 3.141592653589793$

自然対数の底(オイラー数), $e = 2.718281828459045$

公式集

理想気体の状態方程式:

$$PV = nRT$$

ただし P は理想気体における圧力、 V は体積、 n は物質量、 T は絶対温度

熱力学第一法則:

$$\Delta U = q + w$$

ただし、 ΔU は内部エネルギー変化量、 q は供給された熱量、 w はなされた仕事量

エンタルピー H :

$$H = U + PV$$

エントロピーに関するボルツマンの式 S :

$$S = k_B \ln W$$

ただし、 W は微視的な状態数

エントロピー変化 ΔS :

$$\Delta S = \frac{q_{rev}}{T}$$

ただし、 q_{rev} は可逆過程における熱量

ギブスの自由エネルギー G :

$$G = H - TS$$

$$\Delta_r G^0 = -RT \ln K = -zFE^0$$

ただし、 K は平衡定数、 z は電子数、 E^0 は標準電極電位

反応商 Q :

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

$aA + bB \rightleftharpoons cC + dD$ において、

$$Q = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$

ただし $[A]$ は A の濃度を表す。

熱の変化量 Δq :

$$\Delta q = n c_m \Delta T$$

ただし、 c_m は温度に依存しないモル熱容量

酸化還元反応におけるネルンストの式:

$$E = E^0 + \frac{RT}{zF} \ln \left(\frac{C_{ox}}{C_{red}} \right)$$

ただし、 C_{ox} は酸化側の濃度、 C_{red} は還元側の濃度

アレニウスの式:

$$k = A \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right)$$

ただし、 k は速度定数、 A は頻度因子、 E_a は活性化エネルギー

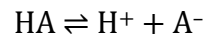
$$\exp(x) = e^x$$

ランベルト-ベールの法則:

$$A = \epsilon lc$$

ただし、 A は吸光度、 ϵ はモル吸光係数、 l は光路長、 c は溶液の濃度

ヘンダーソン-ハッセルバルヒの式:



という平衡において、平衡定数を K_a とすると、

$$\text{pH} = \text{p}K_a + \left(\frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \right)$$

光子のエネルギー:

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda}$$

ただし、 ν は振動数、 λ は光の波長

等比級数の合計:

$x \neq 1$ であるとき、

$$1 + x + x^2 + \dots + x^n = \sum_{i=0}^n x^i = \frac{1 - x^{n+1}}{1 - x}$$

問題を解くのに使ってもよい近似式:

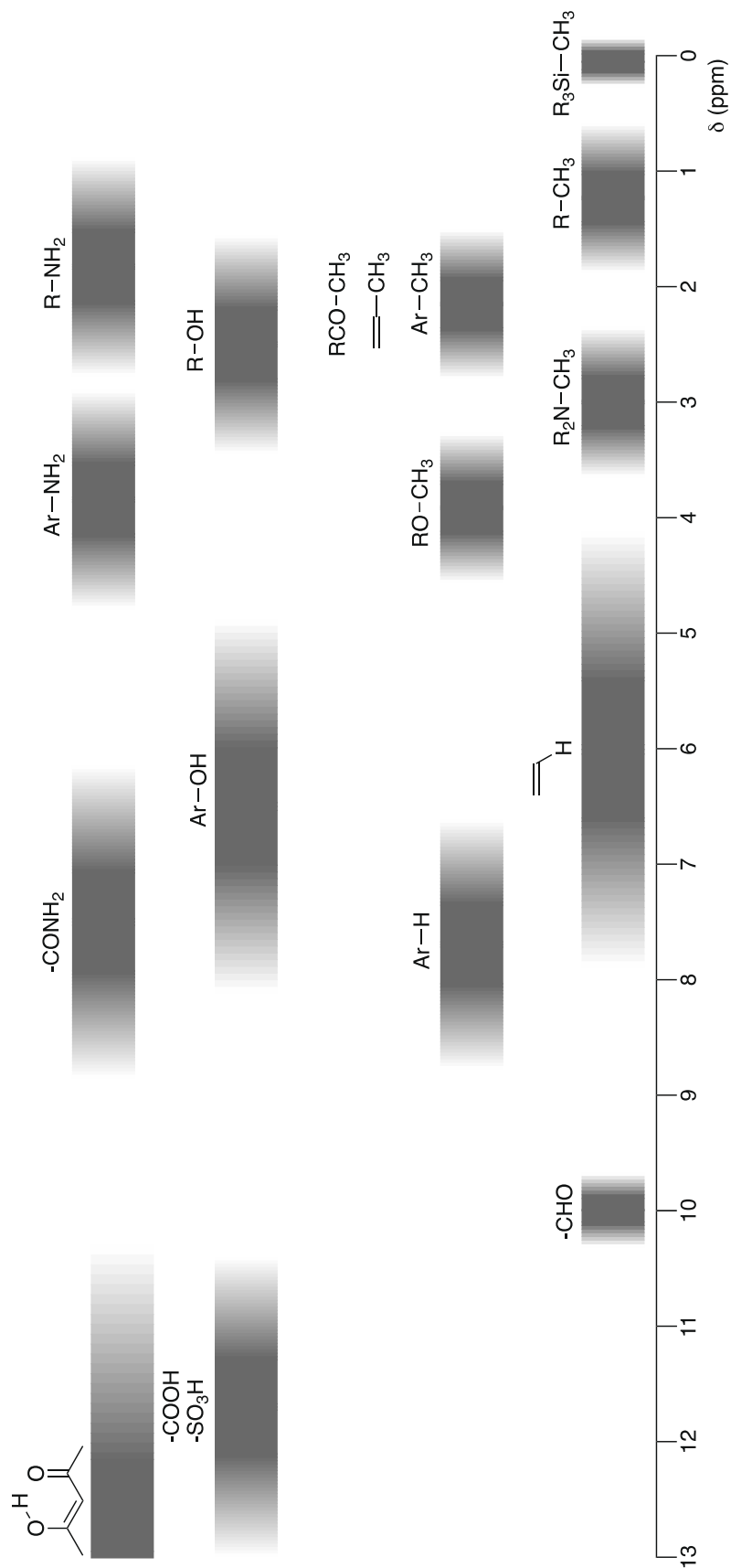
$x \ll 1$ であるとき、

$$\frac{1}{1 - x} \sim 1 + x$$

周期表

| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 | | | | | | | |
|-----------------------------------|----------------------------------|---|--|---------------------------------------|----------------------------------|------------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|------------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|-----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|-------|----------|-------|---------------|--------|------|--|
| 1 H Hydrogen 1.00798 | 2 He Helium 4.002602 | Key: <table border="1"> <tr> <td>113</td><td>Nh</td><td>Nihonium</td><td>[278]</td> </tr> <tr> <td>atomic number</td><td>Symbol</td><td>name</td><td>atomic weight [in parenthesis for the radioactive element]</td> </tr> </table> | | | | | | | | | | | | | | | 113 | Nh | Nihonium | [278] | atomic number | Symbol | name | atomic weight [in parenthesis for the radioactive element] |
| 113 | Nh | | | | | | | | | | | | | | | | Nihonium | [278] | | | | | | |
| atomic number | Symbol | name | atomic weight [in parenthesis for the radioactive element] | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 3 Li Lithium 6.968 | 4 Be Beryllium 9.012183 | 5 B Boron 10.814 | 6 C Carbon 12.0106 | 7 N Nitrogen 14.00686 | 8 O Oxygen 15.9994 | 9 F Fluorine 18.998403 | 10 Ne Neon 20.1797 | 11 Na Sodium 22.989769 | 12 Mg Magnesium 24.306 | 13 Al Aluminum 26.981539 | 14 Si Silicon 28.085 | 15 P Phosphorus 30.973762 | 16 S Sulfur 32.068 | 17 Cl Chlorine 35.452 | 18 Ar Argon 39.948 | | | | | | | | | |
| 19 K Potassium 39.0983 | 20 Ca Calcium 40.078 | 21 Sc Scandium 44.955908 | 22 Ti Titanium 47.867 | 23 V Vanadium 50.9415 | 24 Cr Chromium 51.9961 | 25 Mn Manganese 54.938044 | 26 Fe Iron 55.845 | 27 Co Cobalt 58.933194 | 28 Ni Nickel 58.6934 | 29 Cu Copper 63.546 | 30 Zn Zinc 65.38 | 31 Ga Gallium 69.723 | 32 Ge Germanium 72.630 | 33 As Arsenic 74.921595 | 34 Se Selenium 78.971 | 35 Br Bromine 79.904 | 36 Kr Krypton 83.798 | | | | | | | |
| 37 Rb Rubidium 85.4678 | 38 Sr Strontium 87.62 | 39 Y Yttrium 88.90584 | 40 Zr Zirconium 91.224 | 41 Nb Niobium 92.90637 | 42 Mo Molybdenum 95.95 | 43 Tc Technetium [99] | 44 Ru Ruthenium 101.07 | 45 Rh Rhodium 102.90550 | 46 Pd Palladium 106.42 | 47 Ag Silver 107.8682 | 48 Cd Cadmium 112.414 | 49 In Indium 114.818 | 50 Sn Tin 118.710 | 51 Sb Antimony 121.760 | 52 Te Tellurium 127.60 | 53 I Iodine 126.90447 | 54 Xe Xenon 131.293 | | | | | | | |
| 55 Cs Caesium 132.905452 | 56 Ba Barium 137.327 | 57-71 La-Lu Lanthanoids | 72 Hf Hafnium 178.49 | 73 Ta Tantalum 180.94788 | 74 W Tungsten 183.84 | 75 Re Rhenium 186.207 | 76 Os Osmium 190.23 | 77 Ir Iridium 192.217 | 78 Pt Platinum 195.084 | 79 Au Gold 196.966569 | 80 Hg Mercury 200.592 | 81 Tl Thallium 204.384 | 82 Pb Lead 207.2 | 83 Bi Bismuth 208.98040 | 84 Po Polonium [210] | 85 At Astatine [210] | 86 Rn Radon [222] | | | | | | | |
| 87 Fr Francium [223] | 88 Ra Radium [226] | 89-103 Ac-Lr Actinoids | 104 Rf Rutherfordium [267] | 105 Db Dubnium [268] | 106 Sg Seaborgium [271] | 107 Bh Bohrium [272] | 108 Hs Hassium [277] | 109 Mt Meitnerium [276] | 110 Ds Darmstadtium [281] | 111 Rg Roentgenium [280] | 112 Cn Copernicium [285] | 113 Nh Nihonium [278] | 114 Fl Flerovium [289] | 115 Mc Moscovium [289] | 116 Lv Livermorium [293] | 117 Ts Tennessine [293] | 118 Og Oganesson [294] | | | | | | | |
| 89-103 Ac-Lr Actinoids | 89-103 Ac-Lr Actinoids | 57 La Lanthanum 138.90547 | 58 Ce Cerium 140.116 | 59 Pr Praseodymium 140.90766 | 60 Nd Neodymium 144.242 | 61 Pm Promethium [145] | 62 Sm Samarium 150.36 | 63 Eu Europium 151.964 | 64 Gd Gadolinium 157.25 | 65 Tb Terbium 158.92535 | 66 Dy Dysprosium 162.500 | 67 Ho Holmium 164.93033 | 68 Er Erbium 167.259 | 69 Tm Thulium 168.93422 | 70 Yb Ytterbium 173.045 | 71 Lu Lutetium 174.9688 | | | | | | | | |
| | | | | | | | | | | | | | | | | | 103 Lr Lawrencium [262] | | | | | | | |

^1H NMR 化学シフト値



アルキル基が一つ置換すると約 0.4ppm 値が増大する。