

52th ICHO 预备题中文翻译

ICHO 预备题中文翻译组

February 1, 2020

翻译说明

很高兴可以为大家提供第 52 届 IChO 预备题的中文翻译稿，该译稿基于 2020 年 1 月 31 日发布的原版第一版，我们在翻译过程中已尽可能仔细地审阅过试题（也修正了一些显而易见的错误），但仍可能存在一些难以发现的问题。限于时间与精力，我们不太可能会继续更新新的翻译版本。为确保题目的正确性，请读者自行访问官方网站，查看最新的官方勘误。

官方网站：<https://icho2020.tubitak.gov.tr/icho-2020-hazirlik-sorulari>

本译稿采用知识共享署名-非商业性使用-相同方式共享 3.0 中国大陆许可协议进行许可。全体译稿作者保留追究此协议及相关法律许可内的一切权利。

翻译人员名单（按拼音顺序排列）

翻译：

abc	清华大学
efg	北京大学

图片：

abc	清华大学
efg	北京大学

校对：

abc	清华大学
efg	北京大学

排版：

abc	清华大学
efg	北京大学
L ^A T _E X	

前言

我们非常高兴为将于 2020 年在土耳其伊斯坦布尔举行的第 52 届国际化学奥林匹克竞赛提供预备题。我们准备了这些问题，旨在促进参与者的培训和准备。我们精心选择了问题的内容，以涵盖现代化学和经典化学中可能遇到的一系列具有挑战性的主题。这些问题可以通过应用高中化学的基本原理以及理论部分的 6 个高级难度主题和实践部分的 3 个高级难度主题来解决。这些高级主题明确列在“高级难度主题”下，并且在试题中演示了它们的应用。我们希望参与者熟悉这些高级主题。

本手册中列出的问题包括 25 个理论试题和 8 个实验试题。答案将在 2020 年 3 月 1 日之前通过电子邮件发送到每个国家的首席指导官，并在 2020 年 5 月 15 日之前在我们的 IChO 2020 网站上发布。我们欢迎您对icho2020@tubitak.gov.tr 提出任何意见，建议，更正或疑问。

国际化学奥林匹克提供了一个很好的机会，激发年轻一代从事基础科学事业，并对公众对科学尤其是化学的态度产生积极影响。我们希望您会喜欢解决这些问题，并期待与您在 7 月的土耳其伊斯坦布尔见面。

致谢

我要感谢所有作者为筹备问题做出的奉献和努力，以及国际指导委员会成员的宝贵意见和建议，深表感谢。我们还高度赞赏土耳其科学技术研究委员会（TUBITAK）与伊斯坦布尔科技大学（ITU）理学院合作，为 IChO 2020 之前和期间的所有组织工作提供便利。

代表科学委员会

Dr. Arif DASTAN

目录

作者	v
物理常数与方程	vi
元素周期表	vii
^1H NMR 化学位移	viii
典型的耦合常数	ix
^{13}C NMR 化学位移	x
红外频率吸收表	xi
高级难点	xiii
理论试题	1
第 1 题 丁二烯的 π 电子体系	1
第 25 题 分光光度法测定抗组胺药	2
实验试题	3

作者

ALANYALIOĞLU, Murat, *Atatürk University*
ARSLAN, Yasin, *Burdur Mehmet Akif Ersoy University*
AYDOĞAN, Abdullah, *İstanbul Technical University*
BOZKAYA, Uğur, *Hacettepe University*
BURAT, Ayfer Kalkan, *İstanbul Technical University*
DAĞ, Ömer, *Bilkent University*
DAŞTAN, Arif, *Atatürk University (Chair of Scientific Committee)*
ELTUĞRAL, Nurettin, *Karabük University*
GÖLCÜ, Aysegül, *İstanbul Technical University*
KANBUR, Yasin, *Karabük University*
KILIÇ, Hamdullah, *Atatürk University*
METİN, Önder, *Koç University*
SARAÇOĞLU, Nurullah, *Atatürk University*
TÜRKMEN, Yunus Emre, *Bilkent University*
ÜNLÜ, Caner, *İstanbul Technical University*
YILMAZ, İsmail, *İstanbul Technical University*

编辑:

SARAÇOĞLU, Nurullah, *Atatürk University*

物理常数与方程

Avogadro 常数: $N_A = 6.0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

Boltzmann 常数: $k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$

普适气体常数: $R = 8.3145 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1} = 0.08205 \text{ atm L K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

光速: $c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$

Planck 常数: $h = 6.6261 \times 10^{-34} \text{ J s}$

Faraday 常数: $F = 9.6485 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$

电子质量: $m_e = 9.10938215 \times 10^{-31} \text{ kg}$

标准气压: $P = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$

大气压: $P_{\text{atm}} = 1.01325^5 \text{ Pa} = 760 \text{ mmHg} = 760 \text{ torr}$

摄氏零度: 273.15 K

$1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$; $1 \text{ } = 10^{-10} \text{ m}$; $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$

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

$1 \text{ cal} = 4.184 \text{ J}$

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

电子电荷: $1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$

理想气体方程: $pV = nRT$

焓: $H = U + pV$

Gibbs 自由能: $G = H - TS$

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

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

熵变: $\Delta S = \frac{q_{\text{rev}}}{T}$, 其中 q_{rev} 是可逆过程的热

$$\Delta S = nRT \ln \frac{V_2}{V_1} \text{ (理想气体绝热膨胀)}$$

Nernst 方程: $E = E^\ominus + \frac{RT}{nF} \ln \frac{c_{\text{ox}}}{c_{\text{red}}}$

光子能量: $E = \frac{hc}{\lambda}$

速率方程

零级: $[A] = [A]_0 - kt$

一级: $\ln[A] = \ln[A]_0 - kt$

二级: $\frac{1}{[A]} = \frac{1}{[A]_0} + kt$

Arrhenius 方程: $k = Ae^{-E_a/RT}$

线性回归: $y = mx + n$

标准差: $s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N-1}}$

Lambert-Beer 方程: $A = \varepsilon lc$

元素周期表

Table

^1H NMR 化学位移

111

典型的耦合常数

111

^{13}C NMR 化学位移

111

红外频率吸收表

官能团	振动类型	吸收频率 (cm ⁻¹)	强度
醇			
O-H	(伸缩, H-键合的)	3600-3200	强, 宽
	(伸缩, 自由的)	3700-3500	强, 尖
C-O	(伸缩)	1150-1050	强
烷烃			
C-H	伸缩	3000-2850	强
	弯曲	1480-1350	可变的
烯烃			
=C-H	伸缩	3100-3010	中等
	弯曲	1000-675	强
C=C	伸缩	1680-1620	可变的
烷基卤			
C-F	伸缩	1400-1000	强
C-Cl	伸缩	800-600	强
C-Br	伸缩	600-500	强
C-I	伸缩	500	强
炔烃			
C-H	伸缩	3300	强, 尖
C C	伸缩	2260-2100	可变的, 对称炔没有
胺			
N-H	伸缩	3500-3300	伯胺有两个带, 中等 仲胺有一个带, 非常弱
C-N	伸缩	1360-1080	中等-弱
N-H	弯曲	1600	中等
芳香的			
C-H	伸缩	3100-3000	中等
C=C	伸缩	1600-1400	中等-弱, 多个带
羰基			
C=O	伸缩	1820-1670	强
羧酸			
C=O	伸缩	1725-1700	强
O-H	伸缩	3300-2500	强, 非常宽
C-O	伸缩	1320-1210	强
醛			
C=O	伸缩	1740-1720	强
C-H	伸缩	2850-2820 & 2750-2720	中等, 两个峰
酰胺			
C=O	伸缩	1690-1640	强
N-H	伸缩	3500-3100	未取代的有两个带
	弯曲	1640-1550	
酸酐			
C=O	伸缩	1830-1800 & 1775-1740	两个带
酯			
C=O	伸缩	1750-1735	强
C-O	伸缩	1300-1000	两个或多个带
酮			
非环状	伸缩	1725-1705	强

环状	伸缩	3-元环 - 1850	强
	伸缩	4-元环 - 1780	强
	伸缩	5-元环 - 1745	强
	伸缩	6-元环 - 1715	强
	伸缩	7-元环 - 1705	强
α, β -不饱和的	伸缩	1685–1665	强
芳基酮	伸缩	1700–1680	强
醚			
C–O	伸缩	1300–1000 (1150–1070)	强
腈			
C N	伸缩	2260–2210	中等
硝基			
N–O	伸缩	1560–1515 & 1385–1345	强，两个带

高级难点

理论部分

1. 周环反应（环加成和电环化反应）。
2. sp^2 碳中心的亲核取代反应。
3. 光谱：基本的 ^1H 和 ^{13}C NMR 谱（化学位移，信号多重性，强度和耦合常数）；简单的红外光谱。
4. 动力学：速率常数模型和动力学同位素效应。
5. 基本量子化学：电子能级，应用于共轭体系的跃迁，分子的振动和旋转运动（提供公式），以及共轭体系的简单理论。
6. 无机化学：同/异核双原子分子的配位化学（晶体结构，晶体场论和异构现象）和分子轨道能图。

注意：

i) 下列主题不会在考试中出现

- 金属催化的交叉偶联反应和烯烃复分解反应。
- 使用 Microsoft Excel 或任何相关的计算机软件。
- 使用导数和积分。
- 尽管预备问题中的一些例子与生物分子有关，但不应要求学生将任何生物化学或碳水化合物化学作为高级主题。
- 无机反应机理。
- 多原子分子的分子轨道图。

ii) 除非重要，否则反应流程中的箭头不会显示反应条件，例如溶剂和温度。

实验部分

1. 使用分光光度计（单/双波长测量）。
2. 有机合成中的基本技术：重结晶，薄层色谱法（TLC），过滤和按照所描述的程序干燥沉淀物。
3. 蒸馏和萃取。

注意：下列主题不会在考试中出现

- 确定熔点。
- 使用旋转蒸发器。
- 处理和反应对水分敏感的化合物（使用注射器和气球）。
- 进行柱层析。
- 实验中通过聚合产生水凝胶体系。

理论试题

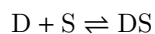
第 1 题 丁二烯的 π 电子体系

test

第 25 题 分光光度法测定抗组胺药

分光光度法用于确定药物分子的简单、快速和准确的方法。该方法基于两种试剂之间形成复合物。许多复合物是有色的，并在可见光区域有吸收。因此可以用分光光度法测定它们。

抗组胺药物 **D** 作为给电子基团，与 π -受体 **S** 复合。所得的复合物在最大吸收 (460 nm) 处记录的吸光度与药物浓度线性相关，具有良好的相关系数。



$$K = \frac{[DS]}{[D][S]}$$

其中 $[DS]$, $[D]$ 与 $[S]$ 分别代表 **DS** 复合物, **D** 与 **S** 的平衡浓度。

$$c_D = [D] + [DS]$$

其中 c_D 是药物的总浓度。

只有所形成的 **DS** 络合物可以吸收光的波长下，以下表达式成立：

$$A = \epsilon_{DS} l [DS]$$

其中 l 是吸收池长度。

可以使用 Benesi-Hildebrand 方程来计算络合物的结合平衡常数，该方程取决于实验条件，其中一种组分应大量过量，以使其浓度不会随复合物的形成而改变。

$$\frac{c_D}{A_{DS}} = \frac{1}{\epsilon_{DS}} + \frac{1}{\epsilon_{DS} K} \times \frac{1}{c_S}$$

其中 c_S 与 c_D 是 **S** 与 **D** 的总浓度。 A_{DS} 是复合物的吸光度， ϵ_{DS} 是复合物的摩尔吸光系数， K 是平衡常数。

tips 此处有图

25.1. 考虑在 25 °C 下记录的 Benesi-Hildebrand 图，给出复合物生成的平衡常数和复合物的摩尔吸光系数。

25.2. **D** 与 **S** 的起始浓度是 $9 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ ，计算平衡时复合物形成的百分数。**D** 与 **S** 在复合的时候比例为 1:1。

25.3. 计算 25 °C 下的 $\Delta_r G^\ominus$ ，单位为 kJ mol^{-1} 。

通过改变温度 (25、45 和 60 °C) 研究 **D** 与 **S** 的络合动力学。该表给出了在不同温度下的络合速率常数。

$T \text{ (}^\circ\text{C)}$	$k \text{ (min}^{-1}\text{)}$
25	0.0200
45	0.0504
60	0.0944

25.4. 计算活化能 E_a 。

25.5. 已知 $k_{TST} = \frac{k_B T}{h} e^{-\frac{\Delta G^\ddagger}{RT}}$ ，计算 25 °C 下的活化焓 ΔH^\ddagger ，活化熵 ΔS^\ddagger 以及活化自由能 ΔG^\ddagger 。(译注：原文为自由活化焓 ΔG^\ddagger)

实验试题