

# CHEMISTRY: ART, SCIENCE, FUN



## 理論競賽 答案卷

**JULY 20, 2007  
MOSCOW, RUSSIA**

Problem 1	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	3.1	3.2	3.3	3.4	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	3	3	2	4.5	2	4	6	24.5	7

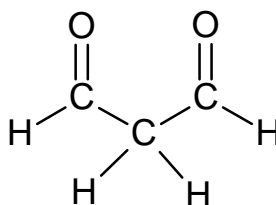
### 1.1.1 結構:

1,3-丙二醛

第一個異構物

第二個異構物

### 1.1.2 圈選酸性氫原子



酸性氫原子是下列何種原因所造成的？

- 兩個羰基的共軛，因而導致 Carbanion 的穩定性
- 羰基中的 C-H 鍵被減弱
- 兩個 1,3-丙二醛間的氫鍵

正確答案是: \_\_\_\_\_

### 1.2.1 對應到位能曲綫最小值的兩個結構:

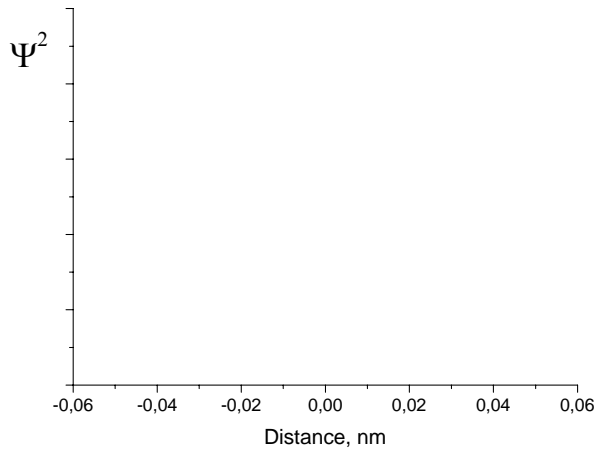
--	--

<b>Problem 1</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	3.1	3.2	3.3	3.4	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	3	3	2	4.5	2	4	6	24.5	7

1.3.1 機率密度

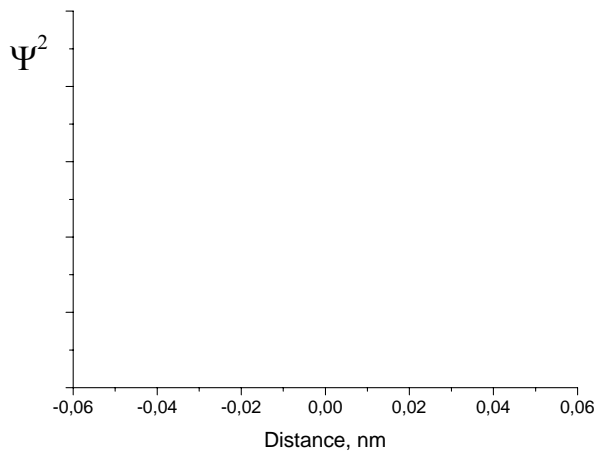
(a)  $t = 0$

$$\Psi^2(x, 0) =$$



(b)  $t = \pi/(2\omega)$

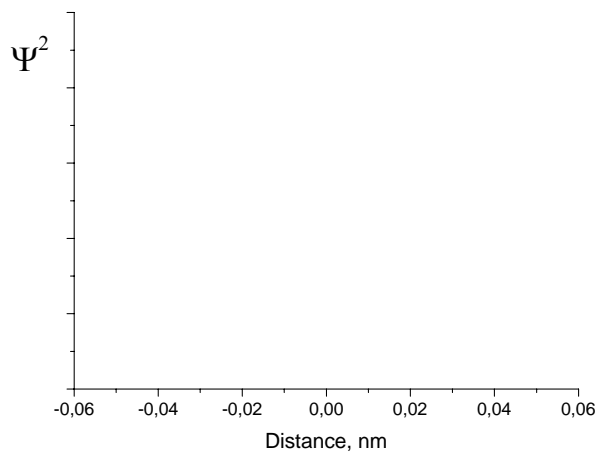
$$\Psi^2\left(x, \frac{\pi}{2\omega}\right) =$$



<b>Problem 1</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	3.1	3.2	3.3	3.4	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	3	3	2	4.5	2	4	6	24.5	7

(c)  $t = \pi/\omega$

$$\Psi^2\left(x, \frac{\pi}{\omega}\right) =$$



### 1.3.2

在左位能井發現質子的機率 = \_\_\_\_\_

### 1.3.3 質子轉移所需的時間

計算過程:

$$t = \underline{\hspace{2cm}}$$

質子的平均速率

計算過程:

$$v = \underline{\hspace{2cm}}$$

### 1.3.4 質子位置的不準度

$$\Delta x =$$

<b>Problem 1</b>	<b>Name:</b> _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	3.1	3.2	3.3	3.4	Tot	Points
	<b>Student code:</b> _____	Marks	3	3	2	4.5	2	4	6	24.5	7

質子速率的最小不準度

計算過程:

$$\Delta v = \underline{\hspace{2cm}}$$

- a) 它在丙二醛中的穿隧現象可以用位置與速度等古典物理量描述。
- b) 質子的穿隧現象純粹是量子效應，無法以古典的方式描述。
- c) 質子速度的不準度是如此大，所以無法被實驗觀測到。
- d) 質子速度的不準度是如此的小，所以無法被實驗觀測到。

正確答案為(單選): \_\_\_\_\_

<b>Problem 2</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	1	2	4	2	1	5	2	3	2	22	8

2.1.1 反應(1)的熱力學資料：

計算過程：

$$\Delta_r G^0(1) =$$

$$K =$$

2.1.2 反應(1)的平衡常數(用鈷奈米粒子)：

計算過程：

$$(a) K(r = 10^{-8} \text{ m}) =$$

$$(b) K(r = 10^{-9} \text{ m}) =$$

<b>Problem 2</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	1	2	4	2	1	5	2	3	2	22	8

**2.2.1** 混合物中水的最小含量：

計算過程：

(a)  $H_2O\%$ (bulk Co) =

(b)  $H_2O\%$ (奈米粒子半徑為  $r = 1 \cdot 10^{-9}$  m) =

**2.2.2** 正確答案為何（單選，在下面適當位置打勾）：

(a)

(b)

(c)

**2.3.1**  $CoO$  的標準莫耳 Gibbs 能（外層）

$G^0(CoO, r_b) =$

**2.3.2**  $Co$  的標準莫耳 Gibbs 能（內層）：

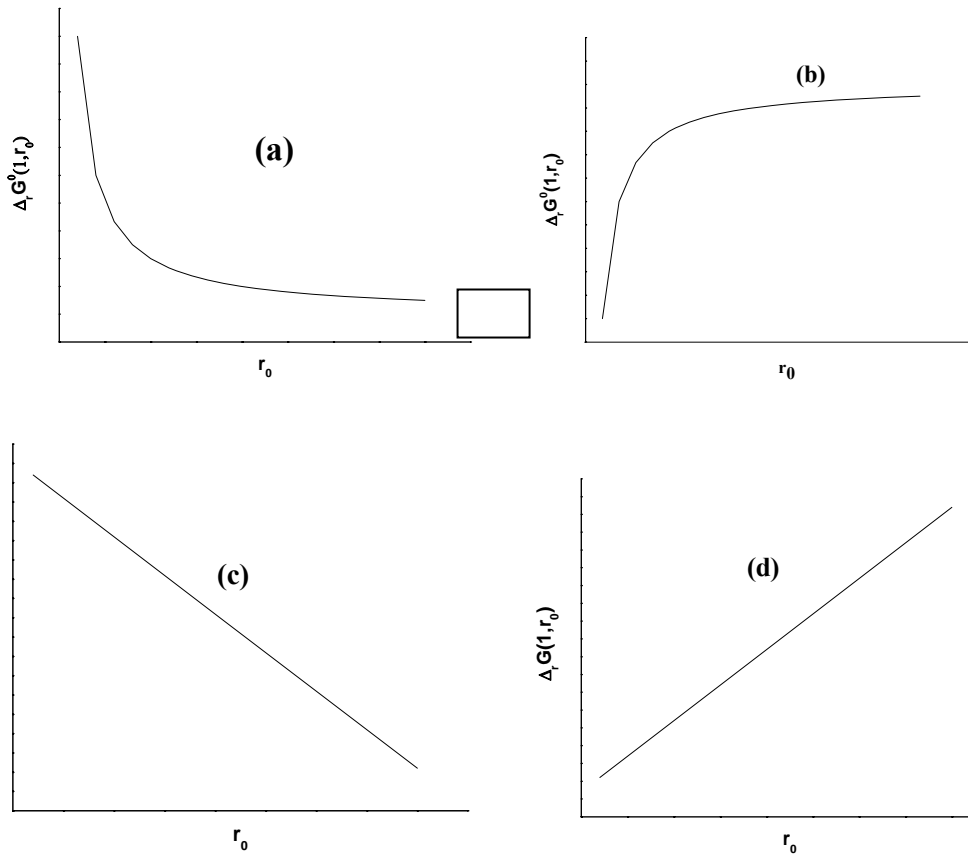
$G^0(Co, r_a, r_b) =$

**2.3.3** 用雙層奈米粒子的情形下，反應(1)的標準 Gibbs 能，

$\Delta_r G^0(l, r_a, r_b) =$

Problem 2	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	1	2	4	2	1	5	2	3	2	22	8

2.3.4.  $\Delta_r G^0(1, r_0)$  對  $r_0$  的作圖



正確的圖為何？（單選，勾出正確的選項）：

- (a)       (b)       (c)       (d)

2.3.5 正確選項為何？（單選，勾出正確的選項）

- (a)       (b)       (c)



<b>Problem 3</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	4.1	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	2	4.5	4	3	3	3	19.5	7

### 3.1.1 全反應式

### X 的速率定律式

$$\frac{d[X]}{dt} =$$

### 3.1.2 速率定律式

計算過程:

$$\frac{d[P]}{dt} =$$

反應級數:

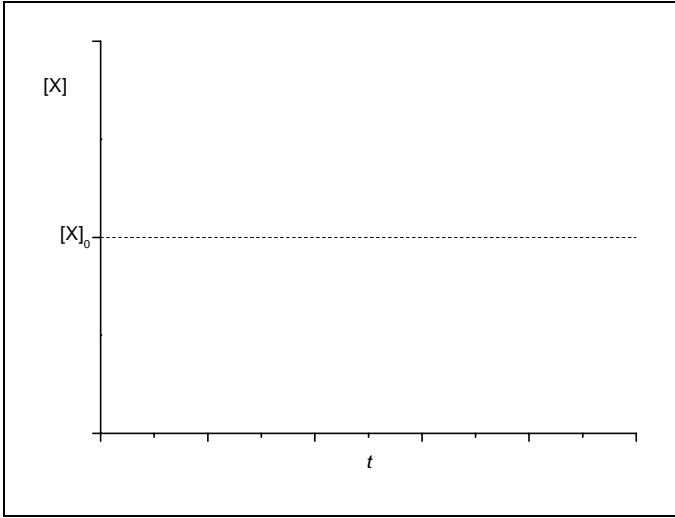
相對於 B 的級數(i): \_\_\_\_\_

相對於 D 的級數(ii): \_\_\_\_\_

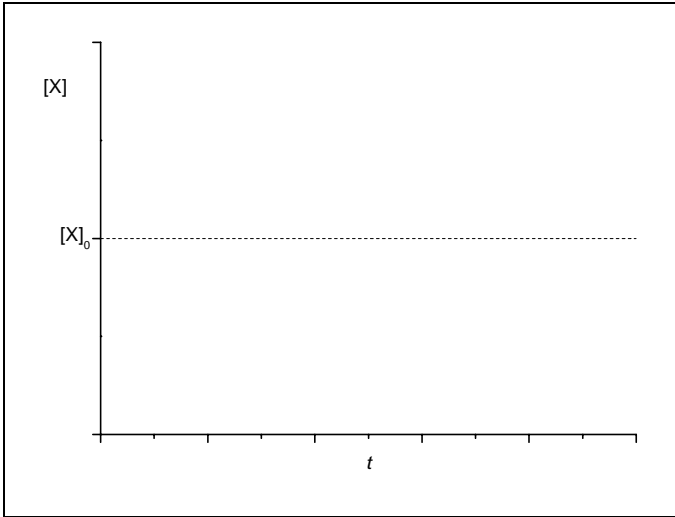
整個反應的級數(iii): \_\_\_\_\_

<b>Problem 3</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	4.1	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	2	4.5	4	3	3	3	19.5	7

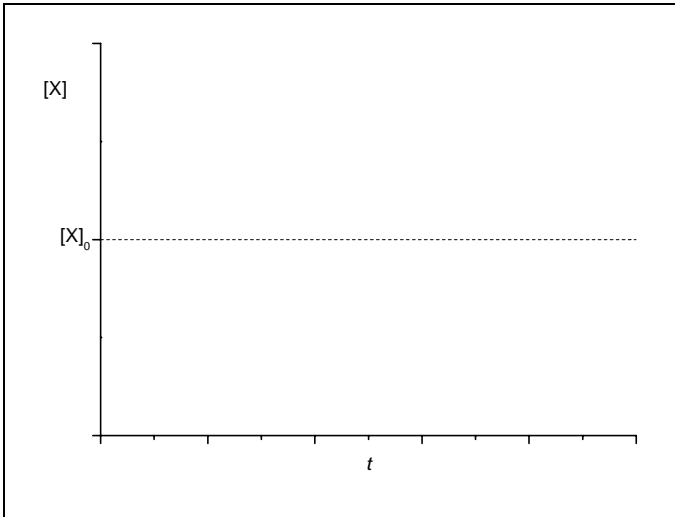
**3.2.1** 1) 開放系統， $[X]_0 > k_2/k_1$



2) 開放系統， $[X]_0 < k_2/k_1$



**3.2.2** 封閉系統， $[B]_0 = [D]_0$ ,  $[X]_0 > k_2/k_1$



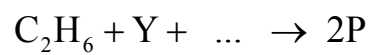
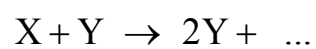
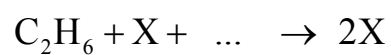
<b>Problem 3</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	4.1	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	2	4.5	4	3	3	3	19.5	7

### 3.3.1

X –

Y –

P –



### 3.4.1 最高可能溫度:

計算過程:

$T =$

<b>Problem 4</b>	Name: _____	Quest.	1	2.1	2.2	2.3	3	4.1	4.2	4.3	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	1	1.25	1.75	2.25	1	2	1	2.25	12.5	8

4.1. 平衡的反應式:

4.2.1. 計算  $T$  值:

計算過程:

$T =$  \_\_\_\_\_  $mg/mL$

4.2.2. 計算  $T$  值:

計算過程:

$T =$  \_\_\_\_\_  $mg/mL$

4.2.3 計算  $T$  值:

計算過程:

$T =$  \_\_\_\_\_  $mg/mL$

<b>Problem 4</b>	Name: _____	Quest.	1	2.1	2.2	2.3	3	4.1	4.2	4.3	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	1	1.25	1.75	2.25	1	2	1	2.25	12.5	8

4.3. 寫出兩個平衡的反應式:

4.4.1 寫出兩個平衡的反應式:

4.4.2. 寫出平衡的反應式:

4.4.3. 結晶水的含量為:

計算過程:

此鹽  $Fe_2(SO_4)_3 \cdot xH_2O$  的  $x$  為何:  $x =$  \_\_\_\_\_

<b>Problem 5</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	3.1	3.2	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	5	5	10	30	10	10	5	75	7.5

### 5.1.1 化合物D的結構

5.1.2 化合物D屬於哪一類的有機化合物? 請勾選適當的空格。

**注意!** 只限勾選一項。若重複勾選本題將不予計分。

酮 ketones	醚 ethers	縮醛/縮酮 acetals	酯 esters	醇 alcohols	醛 aldehydes	甘醇 glycols
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

### 5.1.3 產物D預期的產率

產率是等於85% ; 低於85% ; 高於85%

推導過程

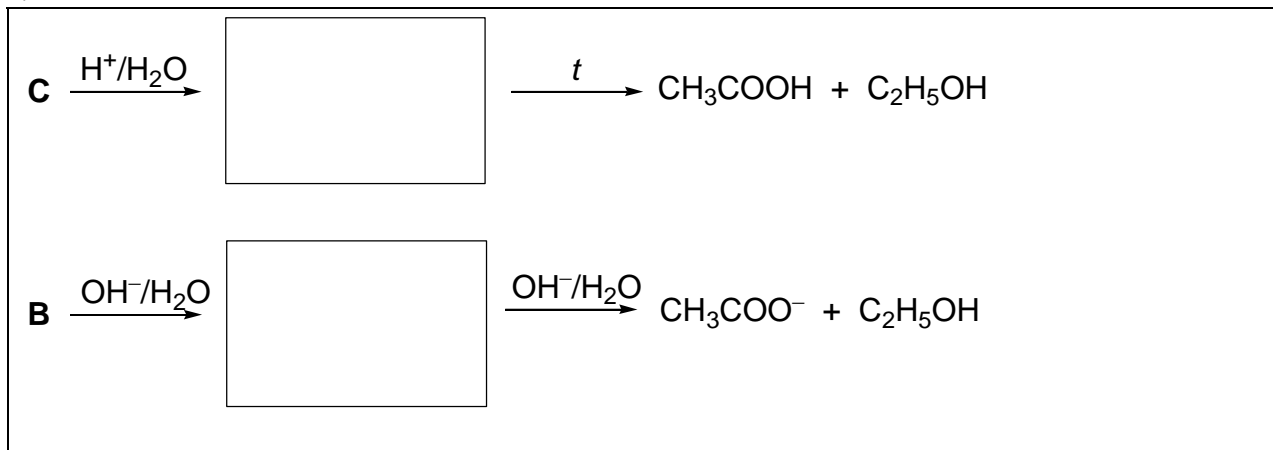
產率 (yield) = \_\_\_\_\_ %

### 5.2.1 化合物A, B及C的結構

<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>

Problem 5	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	3.1	3.2	Tot	Points
		Student code: _____	Marks	5	5	10	30	10	10	5	75

5.2.2 以下空格中畫出反應形成的中間產物: 化合物C在酸性下的水解反應 (acidic hydrolysis), 及化合物B在鹼性下的水解反應 (basic hydrolysis)。



5.3.1 *senecioic acid* 的結構, 並畫出由丙酮形成 *senecioic acid* 的鈉鹽的反應式 (reaction scheme)

5.3.2 化合物E的結構

Problem 6	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	3.2	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	3	9	2	2	3	10	5	3	37	7

6.1.1 寫出  $LGL(Na_2SiO_3)$  和空氣反應的平衡離子方程式(要考慮空氣中有許多的少量氣體)。

6.1.2 寫出下列表格中所問的反應之離子平衡方程式。對每一個反應如果會影響 pH 值的話，就在寫 Yes 的格子內打勾；若不影響 pH 值，就在寫 No 的格子內打勾。

a) 質子化矽酸根( $SiO_4^{4-}$ )直到有一個 Si-OH 產生。

離子平衡方程式:

Yes  No

b) 產生矽酸根 ( $SiO_4^{4-}$ ) 的水合物  $[SiO_4(H_2O)_2]^{4-}$ 。

離子平衡方程式:

Yes  No

c) 縮合矽酸根 ( $SiO_4^{4-}$ ) 到產生一個 Si-O-Si 鍵。

離子平衡方程式:

Yes  No

6.2 以下問題和  $[Si_3O_9]^{n-}$  有關:

6.2.1 決定電荷 (n).

你的推論過程

n = \_\_\_\_\_

6.2.2 判斷此結構中共有幾個氧原子被兩個立方體所共用。

你的推論過程

氧原子的個數 = \_\_\_\_\_

6.2.3 用圖 (I) 之正四面體為最小單位，畫出  $[Si_3O_9]^{n-}$ 。



<b>Problem 6</b>	<b>Name:</b> _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	3.2	Tot	Points
	<b>Student code:</b> _____	Marks	3	9	2	2	3	10	5	3	37	7

**6.2.4** 含 16 個圖 (1) 之正四面體的平面結構

你的推論過程

結構

**6.3.1** 0.1 M  $\text{CuSO}_4$  之水溶液的 pH 值

你的推論過程

pH = \_\_\_\_\_

**6.3.2**  $\text{CuSO}_4$  水溶液和  $\text{Na}_2\text{SiO}_3$  水溶液之反應方程式

<b>Problem 7</b>	<b>Name:</b> _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	Tot	Points
	<b>Student code:</b> _____	Marks	12	12	5	12	7	8.5	16	72.5	7.5

7.1.1 下表列出一些反應類型。HMG-CoA 到 IPP 的代謝過程所包含的反應都在表中。選出 E1 及 E3 所催化的反應類型 (將數字填入適當的位置)

No	反應類型 (Reaction type)
1.	脫水反應
2.	去羧基反應 (Decarboxylation)
3.	去磷酸化反應 (Dephosphorylation)
4.	四電子還原反應 (4 electron reduction)
5.	釋放還原態的輔酶-A (Release of the reduced form of coenzyme A (CoA-SH) )
6.	單磷酸化反應 (Monophosphorylation)
7.	在第三階段 HMG-CoA $\beta$ -氧化循環中羥基的氧化反應 (Oxidation of hydroxyl group as the third stage of HMG-CoA $\beta$ -oxidation cycle)

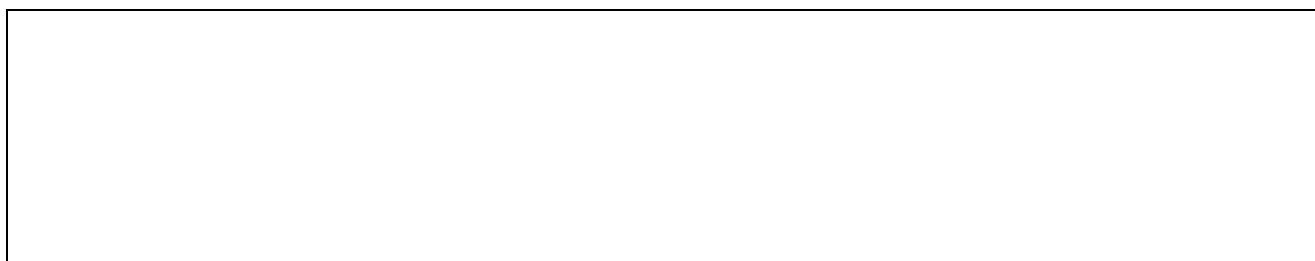
E1

E3

7.1. 畫出X的結構，需包含詳細的立體化學並指出立體中心 (stereocenter) 的絕對構形 (R 或S)。



7.2.1 寫出DAP 進行還原臭氧化反應完整的反應方程式，其中進行臭氧化反應所用的還原劑為二甲基硫 (dimethyl sulfide)。



<b>Problem 7</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	2.4	2.5	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	12	12	5	12	7	8.5	16	72.5	7.5

### 7.2.2 決定Y 的分子式

你的推導過程:

碳原子數 \_\_\_\_\_  
 氫原子數 \_\_\_\_\_  
 分子式: \_\_\_\_\_

### 7.2.3 計算形成一個分子的Y5 共需要幾分子的IPP 及DAP 。

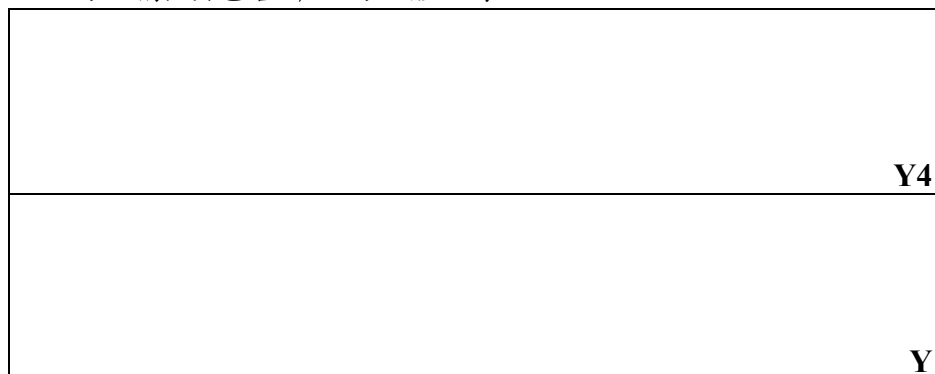
你的推導過程:

IPP 分子的數目 \_\_\_\_\_  
 DAP 分子的數目 \_\_\_\_\_

7.2.4 畫出由一分子IPP 及一分子DAP 進行耦合反應所形成的產物(碳-碳鍵) 僅能以星號標示位置的碳原子來形成), 若已知該耦合產物在進行還原臭氧化之後會生成Y1, Y2 及另一個含有磷原子的化合物。



7.2.5 畫出Y 及Y4 的結構, 須包含詳細的立體化學。



<b>Problem 8</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	3.3	3.4	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	8	9	5	11	14	16.5	12	10	13.5	99	8

**8.1.1 速率的表示式:**

$V_{act} =$	$V_p =$
$V_{deact} =$	$V_t =$

**8.1.2 用符號  $\ll, \leq, \approx, \geq, \gg$  比較下列速率**

$V_{deact} \quad V_{act}$	$V_{deact} \quad V_t$
$V_{deact} \quad V_p$	

**8.2.1 所得高分子的質量**

你的推導過程:

$m =$  \_\_\_\_\_

**8.2.2 所得高分子的聚合度**

你的推導過程:

$DP =$  \_\_\_\_\_



<b>Problem 8</b>	Name: _____	Quest.	1.1	1.2	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	3.3	3.4	Tot	Points
	Student code: _____	Marks	8	9	5	11	14	16.5	12	10	13.5	99	8

### 8.3.3. 活化的所有可能的反應

P1:

P2:

### 8.3.4 P1 的結構與一種P2 可能的結構

P1:

P2: