

## 問題6 ジベンジルの化学結合

この問題は熱力学サイクルを利用して結合解離エンタルピーを見積もる典型例である。

トルエン（メチルベンゼン）の熱分解における第一段階は $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{-H}$ の解離である。この過程の活性化エンタルピー（結合解離エンタルピー）は  $378.4 \text{ kJ mol}^{-1}$  であることがわかっている。

a) トルエンの完全燃焼に関する熱化学方程式を書け。

IUPAC が推奨する表記（f = 生成、c = 燃焼、vap = 蒸発、at = 原子化）を用いて、標準エンタルピーを以下の様に与える。

$$\Delta_f H^\circ(\text{CO}_2, \text{g}, 298\text{K}) = -393.5 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_f H^\circ(\text{H}_2\text{O}, \text{l}, 298\text{K}) = -285.8 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_c H^\circ(\text{C}_7\text{H}_8, \text{l}, 298\text{K}) = -3910.2 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_{\text{vap}} H^\circ(\text{C}_7\text{H}_8, \text{l}, 298\text{K}) = +38.0 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_{\text{at}} H^\circ(\text{H}_2, \text{g}, 298\text{K}) = +436.0 \text{ kJ mol}^{-1}.$$

- i)  $\Delta_f H^\circ(\text{C}_7\text{H}_8, \text{l}, 298\text{K})$  を計算せよ。
- ii) ベンジルラジカル ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\cdot(\text{g})$ ) の 298K における  $\Delta_f H^\circ$  を見積もれ。

b) トルエンの標準蒸発エントロピーは  $99.0 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$  である。

- i) トルエンに関する  $\Delta_{\text{vap}} G^\circ$  を計算せよ。
- ii) 298K におけるトルエンの基準状態は何か？  
(訳注：「基準状態」とは、指定された温度と 1 bar の圧力において最も安定な状態である。)
- iii) トルエンの標準沸点を計算せよ。

- c) ジベンジル (1,2-ジフェニルエタン) の標準生成エンタルピーは  $143.9 \text{ kJ mol}^{-1}$  である。ジベンジル  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}_2\text{-CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$  における中央の C-C 結合の結合解離エンタルピーを計算せよ。