

問題 3 液体ベンゼンの水素化の研究

液体ベンゼンの標準生成エンタルピーの決定

1. 液体ベンゼンを構成元素の単体の標準状態から生成する、両辺の釣り合った反応式を書け。
2. 本題の末尾に記されている標準結合エンタルピー、標準解離エンタルピー、およびベンゼンの標準昇華エンタルピーのデータから、液体ベンゼンの標準生成エンタルピー $\Delta_f H^\circ(\text{C}_6\text{H}_6(\text{l}))$ を計算せよ。
3. 液体ベンゼンの標準生成エンタルピー $\Delta_f H^\circ(\text{C}_6\text{H}_6(\text{l}))$ を、ヘスの法則を用いて計算せよ。
4. 2.と3.で得られた $\Delta_f H^\circ(\text{C}_6\text{H}_6(\text{l}))$ の値の差を計算せよ。この差に関する説明として正しいものを選び。
 - 標準燃焼エンタルピーの値の実験誤差が差の原因である。
 - 2.で用いた方法はベンゼンの結合の性質を考慮していないため差が生じた。
 - ヘスの法則は標準生成エンタルピーにしか厳密に適用できないため差が生じた。
 - 3.で用いた方法は電子の非局在化の効果を考慮していないため差が生じた。

液体ベンゼンの段階的水素化反応の研究

5. 液体ベンゼンを完全に水素化して液体シクロヘキサンに変換する反応の標準反応エンタルピーを計算せよ。

ベンゼンをシクロヘキサンまで水素化する反応の各ステップを図1に示す。

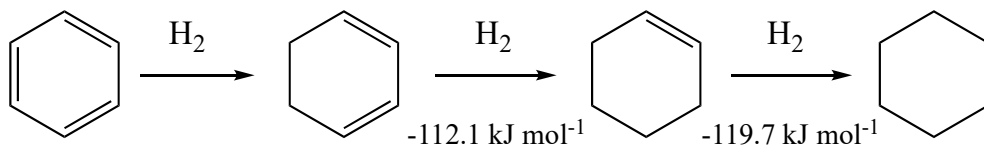


図1: ベンゼンの水素化

6. ベンゼンをシクロヘキサ-1,3-ジエンに水素化するときの標準反応エンタルピーを計算することで、図1を完成させよ。

この反応の標準反応エンタルピーは、図1の他の反応の標準反応エンタルピーとは符号が異なる。

7. その差が生じた最大の理由はなにか？
 - ベンゼンではすべての二重結合が等価ではなく、1つが他よりも強いから。
 - ベンゼンの芳香族性が失われるから。
 - 反応中間体(シクロヘキサ-1,3-ジエン)が立体的に不安定だから。
8. 図1に書かれている値のみから、シクロヘキサ-1,3-ジエンとベンゼンの共鳴エネルギーを計算せよ。

データ:

298 K における標準燃焼エンタルピー $\Delta_{\text{comb}}H^\circ$ (単位: kJ mol^{-1})

化学種	C(グラファイト)	H ₂ (g)	C ₆ H ₆ (l)
$\Delta_{\text{comb}}H^\circ$	-393.5	-285.6	-3268

298 K におけるシクロヘキサンの標準生成エンタルピー

$$\Delta_f H^\circ(\text{C}_6\text{H}_{12}(\text{l})) = -156.4 \text{ kJ mol}^{-1}$$

298 K における標準結合エンタルピー $\Delta_d H^\circ$ (単位: kJ mol^{-1})

結合	C—H	C—C	C=C
$\Delta_d H^\circ$	414.8	346.9	614.5

298 K における標準解離エンタルピー D° (単位: kJ mol^{-1})

結合	O=O	H—H
D°	498.3	436.0

298 K における標準潜熱 (単位: kJ mol^{-1})

$$\Delta_{\text{sub}}H^\circ(\text{C(グラファイト)}) = 716.70 \text{ kJ mol}^{-1}$$

$$\Delta_{\text{vap}}H^\circ(\text{C}_6\text{H}_6) = 33.90 \text{ kJ mol}^{-1}$$