

Preparatory Problems IChO 2012

Theoretical Problems



問題 6. シラン：熱化学と結合解離エンタルピー

結合解離エンタルピー（または結合解離エネルギー）は化合物における結合強度の大きさである。それは、発熱反応であるか吸熱反応であるかを推測する、すなわち、反応で生じるエンタルピー変化を予想するのに便利である。解離エンタルピーの使い方の一つは、しばしば直接測定できないパラメーターである原子-原子間結合強度を決定することである。ここで、Si-Si 結合強度を決定してみよう。

水素化ケイ素 $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$ はシランと呼ばれている。それらのほとんどが Si-Si 結合を含むが、ケイ素原子の数の増加とともに次第に不安定になる。

a) 以下に示す値を用いて Si_2H_6 の Si-Si 結合解離エンタルピーを計算せよ。

$$\text{H-H の結合解離エンタルピー} = 436 \text{ kJ/mol}$$

$$\text{Si-H の結合解離エンタルピー} = 304 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_f H [\text{Si(g)}] = 450 \text{ kJ/mol}$$

$$\Delta_f H [\text{Si}_2\text{H}_6(\text{g})] = 80.3 \text{ kJ/mol}$$

b) 計算された Si-Si 結合エネルギーを炭素-炭素単結合の結合エネルギー（結合解離エンタルピー = 347 kJ/mol）と比較しなさい。 $n = 2$ 以上のシランの熱力学的安定性に対応するアルカンと比べてみて、どんなことが言えるだろうか。
なお、C-H の結合解離エンタルピー = 412 kJ/mol である。