【問題Ｃ】

水素とヨウ素を反応容器に入れて高温で気体の状態に保つと,ヨウ化水素を生成して平衡に達する。この反応について問いに答えよ。結合エネルギーは，H－H が 436kJ/mol，I－I が 151kJ/mol，H－I が 298kJ/mol である。
また，ヨウ化水素を生成する正反応の活性化エネルギーは 167kJ である。

(1)　ヨウ化水素の生成熱を求めよ。

生成熱……単体（I_2とH_2）から１ mol の生成物（ＨＩ）ができるときの反応熱

$$H_2 + I_2 \rightleftarrows 2HI$$

$$\therefore\ \frac{1}{2}H_2 + \frac{1}{2}I_2 \rightleftarrows HI + Q\ \text{KJ}$$

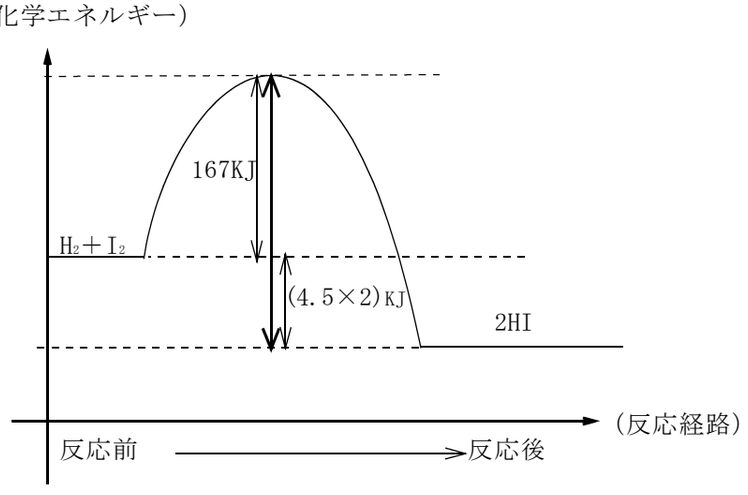
$\frac{1}{2}$(H－H)　$\frac{1}{2}$(I－I)　(H－I)

反応熱＝（右辺の結合Ｅの和）－（左辺の結合Ｅの和）

$$= (H-I) - \left\{\frac{1}{2}(H-H) + \frac{1}{2}(I-I)\right\}$$

$$= 298 - \frac{1}{2}(436 + 151) = +4.5\ \text{(KJ)}$$

(2)　逆反応は正反応と同じ活性化状態を経て進行する。
逆反応の活性化エネルギーを求めよ。



図より
２ＨＩ　⟶　H_2 ＋ I_2 の活性化エネルギーは　167 + 4.5 × 2 ＝ 176（ＫＪ）

(3)　１ ℓ の反応容器に水素とヨウ素をそれぞれ 1.00×10^{-2} mol 入れて 700K に保ったら，1.58×10^{-2} mol のヨウ化水素を生成して平衡に達した。
700K における平衡定数の値を求めよ。

１ ℓ の容器内で考えると

	H_2	＋	I_2	⇄	2HI	
（反応前）	0.01		0.01		0	(mol)
（平衡時）	$0.01-\frac{X}{2}$		$0.01-\frac{X}{2}$		X	(mol)
	0.0021		0.0021		$\boxed{0.0158}$	

X ＝ 0.0158 より、平衡時の水素、ヨウ素のモル数は

$$0.01-\frac{X}{2} = 0.01-\frac{0.0158}{2} = 0.0021$$

平衡定数Ｋを求めると

$$K=\frac{[HI]^2}{[H_2][I_2]}$$

$$=\frac{\left[\frac{0.0158}{1}\right]^2}{\left[\frac{0.0021}{1}\right]\left[\frac{0.0021}{1}\right]}$$

$$= \frac{(0.0158)^2}{(0.0021)^2} \fallingdotseq 56.6$$

【問題Ｄ】

酢酸 120g とメタノール 64g を混合して，エステル化反応の実験を行った。
下記の問いに答えよ。ただし，数値は小数点以下第 1 位まで求めなさい。
ただし、 原子量は，H ＝ 1.0，C ＝ 12.0，O ＝ 16.0 とする。

(1)　この反応の平衡定数 *K* を表す式を記せ。

$$CH_3COOH + CH_3OH \rightleftarrows CH_3COOCH_3 + H_2O$$

$$K = \frac{[CH_3COOCH_3][H_2O]}{[CH_3COOH][CH_3OH]}$$

(2)　*K* の値が 4.0 のとき，平衡時に存在するエステルの質量を求めよ。

$$CH_3COOH + CH_3OH \rightleftarrows CH_3COOCH_3 + H_2O$$

反応前	$\frac{120}{60}$	$\frac{64}{32}$	0	0
平衡時	$\frac{120}{60} - X$	$\frac{64}{32} - X$	X	X

$$K = \frac{\frac{X}{V} \times \frac{X}{V}}{\frac{2-X}{V} \times \frac{2-X}{V}} = \frac{X^2}{(2-X)^2} = 4.0$$

$\therefore 3X^2 - 16X + 16 = (3X-4)(X-4) = 0$

$\therefore X = 4$ *or* $\frac{4}{3}$　　X＝４は不適だから $X = \frac{4}{3}$

よって、CH_3COOCH_3（＝７４）は

$\frac{4}{3} \times 74 = 98.666 \fallingdotseq 98.7_{(g)}$

(3)　(2)の状態にある反応系に水 54g を加えたとき，その平衡時に存在するエステルの質量を求めよ。

↓

$$CH_3COOH + CH_3OH \rightleftarrows CH_3COOCH_3 + H_2O$$

(←)

水を追加すると、平衡は左に移動する。

(平衡時)				
反応前	$2 - \frac{4}{3}$	$2 - \frac{4}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{4}{3}$
水を54ｇ追加				$+\frac{54}{18}$
平衡時	$\frac{2}{3} + X$	$\frac{2}{3} + X$	$\frac{4}{3} - X$	$\frac{13}{3} - X$

(水を追加後の新たな平衡状態)

水を加えることによって、平衡が移動し新たな平衡状態になる。

$$K = \frac{\left(\frac{\frac{4}{3} - X}{V}\right) \times \left(\frac{\frac{13}{3} - X}{V}\right)}{\left(\frac{\frac{2}{3} + X}{V}\right) \times \left(\frac{\frac{2}{3} + X}{V}\right)}$$

$$= \frac{\left(\frac{4}{3} - X\right)\left(\frac{13}{3} - X\right)}{\left(\frac{2}{3} + X\right)^2}$$

$$= \frac{52 - 12X - 39X + 9X^2}{4 + 12X + 9X^2} = 4$$

$\therefore 27X^2 + 99X - 36 = 0$

$\therefore 3X^2 + 11X - 4 = (3X-1)(X+4) = 0$

$\therefore X = \frac{1}{3}, -4$

X＝４は不適，　よって $X = \frac{1}{3}$

ゆえに、平衡時に存在する酢酸メチルは

$\frac{4}{3} - X = \frac{4}{3} - \frac{1}{3} = \frac{3}{3}$

$= 1_{(mol)}$

よって、CH_3COOCH_3（＝７４）は，74*g*存在する。