

[物理化学標準]

1,3-ブタジエン ( $C_4H_6$ ) はディールス・アルダー反応 ([4+2]環化付加反応) により二量化してシクロヘキセン誘導体  $C_8H_{12}$  となる. 時刻  $t=0$  s で, ある量の 1,3-ブタジエンを温度 400 K の密閉容器に導入し, その後, 全圧力 ( $P_{total}$ ) を測定した. この気相反応の実験結果を表 1 に示す. 容器内の分子は理想気体とみなす. 以下の設問に答えよ.

時刻 $t$ ( $\times 10^3$ s)	全圧力 $P_{total}$ ( $\times 10^4$ Pa)
0	8.34
1.00	7.50
2.00	6.95
4.00	6.25
6.00	5.84

表 1: 容器内の圧力変化.

- (a) この反応を化学構造式で示せ.
- (b) 表 1 の各時刻における 1,3-ブタジエンの分圧  $P_{bd}$  を求めよ.
- (c) 反応の次数は実験により決定することができる. 表 1 の実験結果を解析することにより, この反応が 2 次反応であることを示せ. 解析に際しては, 下のグラフ用紙を利用して良い. 解答用紙にはグラフの概略を描き説明せよ.
- (d) 実験結果から, 2 次反応の速度定数を有効数字 2 桁で求めよ. 必要ならば, 気体定数  $R = 8.31$  ( $J K^{-1} mol^{-1}$ ) を用いても良い. 答えだけでなく, 途中の計算過程を記述すること.

