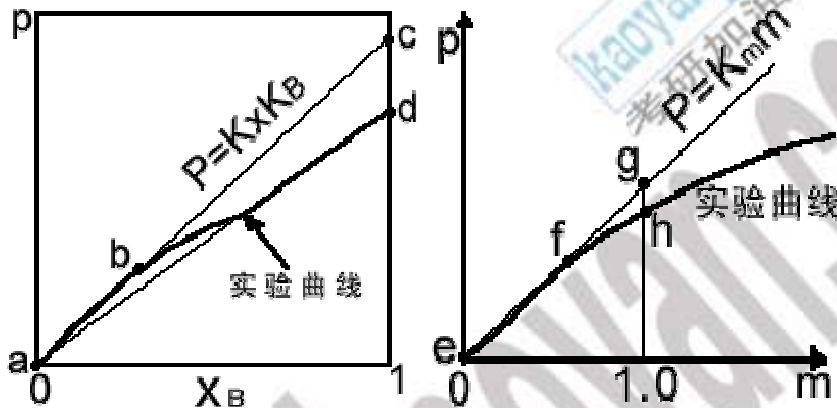


一、(共 16 分)填空与问答题(1)

1. 绝热过程中, 环境对体系所作的功只为()所决定, 而与 ()无关。
2. 对二元溶液 Z_1, m, Z_2, m 分别表示两个组分的偏摩尔量, 有 $X_1(\partial Z_1, m / \partial X_1)_T, PdX_1 + () = 0$.
3. 平衡常数 $K_c = [f_G / (f_D \cdot f_E)] \exp(-\Delta \varepsilon_0 / kT)$, 表达式中的 f 与配分函数 q 的关系是 $f = ()$.
4. 298K, 1 摩尔 A 与 1 摩尔 B 混合形成理想溶液, 其混合吉布斯自由能 $\Delta_{mix}G = ()J$.

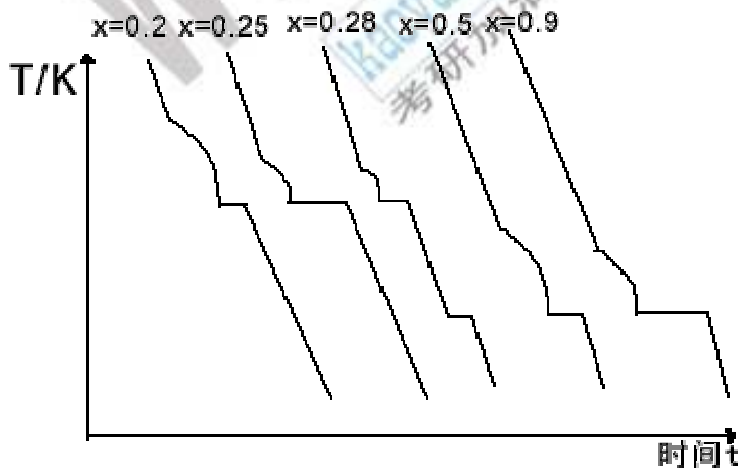
5. 如图



若 $\mu_B = \mu_B^*(T) + RT \ln(P_B^* X_B / P^0) = \mu_B^*(T, P) + RT \ln X_B$
或 $\mu_B = \mu_B^*(T, P) + RT \ln(m / m^0)$, 式中 P_B^* 为纯 B 的蒸汽压。在
上图所表示的 a, b, c, d, e, f, g, h, 诸多状态中, $\mu_B^*(T, P)$ 所
对应的状态是 (), $\mu_B^*(T, P)$ 所对应的状态是 ()。

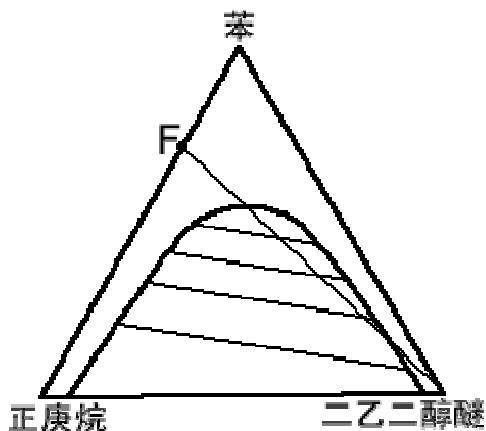
6. $KNO_3, KCl, H_2O(1)$ 体系的独立组分数为 (); $KNO_3, NaCl, H_2O(1)$ 体系的独立组分数为 ()。

7. 乙胺-水二元系的步冷曲线如下图所示, 图中 x 是三乙胺的物质的量分数 (摩尔分数)。



该体系所形成化合物的分子式是 ()。

8. 苯-正庚烷-二乙二乙纯三元相图如下:



在苯-正庚烷混合物(F)中, 加入二乙二醇醚进行液-液萃取, 反复萃取后, 在萃取相排出的是(), 在萃余相送出的是()。

二、(共 20 分)计算题(1):

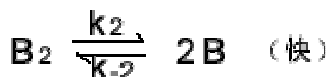
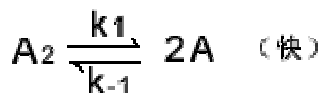
- 在 $T=268.2\text{K}$ 和 P_0 时, 1 摩尔液态苯凝固, 放热 9874J 。求苯凝固过程中的 $\Delta H, \Delta S$ 和 ΔG 。已知苯的熔点 278.7K , $C_{p,m}(\text{液})=126.8\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ 则 $C_{p,m}(\text{固})=122.6\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。
- N_2 的转动常数 $B=h/8\pi^2I=5.96\times 10^{10}\text{S}^{-1}$, 计算下列温度时, $J=1$ 和 $J=0$ 转动能级上的分子数之比
(1) 200K ; (2) $T\rightarrow\infty$; (3) $T\rightarrow 0$
已知: 普朗克常数 $h=6.626\times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{S}$
玻兹曼常数 $k=1.381\times 10^{-23}\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$ 。
- 低压气相反应 $\text{S}_2(\text{g})+\text{2H}_2(\text{g})\rightarrow\text{2H}_2\text{S}(\text{g})$ 的平衡常数与温度的关系式为

$$\lg K_p^\theta = 8400/T - 0.974 \lg T - 7.2 \times 10^{-4}T - 0.72$$

试计算 1000K 时的反应热 $\Delta_r H_m^\theta$ 。

三、(共 18 分) 填空与问答题(2):

- 设反应为 $a\text{A}\rightarrow b\text{B}$, 则反应进度 ξ 可表示为()。
- 反应 $\text{H}_2 + \text{Cl}_2 = 2\text{HCl}$ 的速率方程为 $r=k[\text{H}_2] + [\text{Cl}_2]^{1/2}$, 则速率常数 K 的量纲为 ()。
- 设反应 $\text{A}_2 + \text{B}_2 = 2\text{AB}$ 的反应机理为:

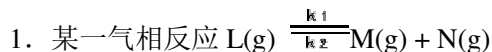


试写出其动力学方程的表示式()。

- 催化剂所以能改变反应速率, 是由于()。

5. 摩尔电导率 Λ_m 是(), 其与电导率 K 的关系是().
6. 电解过程中, 化作用使消耗的电能(); 在金属的电化学腐蚀过程中, 极化作用使腐蚀速度().
7. 表面吉布斯自由能的表达式是(), 其量纲为(); 表面张力是(), 其量纲为().
8. 一般说来, 物理吸附的吸附量随温度增高而(), 化学吸附的吸附量随温度增高而().
9. 以 KI 为稳定剂的 AgI 水溶胶, 其结构可表示为().

四、(共 18 分)计算题(2): >



已知在 298K 时, $k_1=0.21s^{-1}$, $k_2=5 \times 10^{-9} Pa^{-1} \cdot s^{-1}$. 当温度升至 310K 时, k_1 和 k_2 值均增加一倍, 试求:

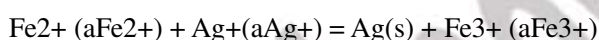
- (1) 298K 时的平衡常数 K_p ;
- (2) 正、逆反应的实验活化能;
- (3) 反应的 $\Delta_r H_m^\ominus$.

2. 对于气相单分子反应, 活化熵往往可以忽略(假定活化熵为零) 试计算 300K, 活化焓为 $62.7 kJ \cdot mol^{-1}$ 时, 其反应速率常数 k 和 $t_{1/2}$.

已知: 普朗克常数 $h=6.626 \times 10^{-34} J \cdot s$,

玻兹曼常数 $K=1.3812 \times 10^{-23} J \cdot K^{-1}$.

3. 试设计一个电池, 使其中进行下述反应



- (1) 写出电池的表示式;
- (2) 计算上述电池反应在 298K, 反应进度 ξ 为 1mol 时的平衡常数 K_a^\ominus ;
- (3) 若将过量磨细的银粉加到浓度为 $0.05 mol \cdot kg^{-1}$ 的 $Fe(NO_3)_3$ 入溶液中, 当反应达到平衡后, Ag^+ 离子的浓度为多少?(设活度系数均为.

已知: $\Psi_{Ag^+, Ag} = 0.7991V$, $\Psi_{Fe^{3+}, Fe^{2+}} = 0.771V$

五、填空题 (10 分)

1. 前线轨道指的是_____.
2. 己三烯在_____ 条件下进行对旋闭环反应.
3. $(CH_3)_2SnF_2$ 中 Sn 的杂化形式为_____, 几何构形为_____, 属于_____ 点群.
4. 环戊二烯负离子中含有的大 π 键为 _____, 其 Huckel 久期行列式为_____.
5. 晶体的微观对称性所特有的对称操作包括_____.
6. 有一晶面与晶轴相交于 $(3a, 2b, -c)$ 处, 则其晶面指标为_____.
7. 有一质量为 m 的粒子在一维势箱中运动, 其 Schrodinger 方程为_____.

六、选择题 (10 分)(选一个答案)

1. 下面四种分子和离子中为顺磁性的是_____。
A) N_2 (B) N_0 (C) CN^- (D) O_2^-
2. Nb 原子的基态光谱支项为 _____。
(A) $6D_2$ (B) $3F_4$ (C) $2P_{3/2}$ (D) $6D_{1/2}$
3. 下列配位离子中会发生 Jahn-Teller 畸变的为_____。
(A) $Ni(H_2O)_6^{2+}$ (B) MnO_4^- (C) $Cr(H_2O)_6^{3+}$ (D) $Fe(CN)_6^{3-}$

4. 同核双原子分子 Br₂, C₂, N₂, O₂ 和 F₂ 的键长大小次序为_____。
(A) B₂<C₂<N₂<O₂>F₂ (B) B₂<C₂<N₂>O₂>F₂ (C) B₂>C₂>N₂<O₂<F₂ (D) B₂>C₂>N₂>O₂>F₂

5. AsH₃, ClF₃, SO₃, SO₃²⁻, CH₃⁺, CH₃⁻ 中没有偶极矩的为_____。

(A) ClF₃ 和 CH₃⁻ (B) SO₃ 和 CH₃⁺ (C) AsH₃ 和 CH₃⁻ (D) ClF₃ 和 SO₃²⁻

七、β-SiC 为立方面心金刚石结构，晶胞参数 a=4.358Å，C 原子量为 12.011，Si 原子量为 28.085，CuKα 射线波长 λ=1.54×10⁻¹⁰m。(8 分)

(I) 写出晶胞中各个原子的分数坐标。

(II) C 周围 Si 的配位数和 Si 周围 C 的配位数。

(III) 计算晶体的密度 D。

(IV) 用 CuKα 衍射计算(200)衍射的衍射角 θ 值