

一、填空(本题 30 分,每小题 2 分)

1. 5mol 理想气体(单原子分子)的 $(\partial H/\partial T)_V = (\quad)$ 。

2. 1mol 双原子分子理想气体从 202.650kPa 和 273K 的状态变化到 101.325kPa 和 298K 的状态,该过程之 $\Delta H = (\quad)$ 。

3. 若以 μ_1 表示 100°C 与 101.325kPa 时液态水的化学位, μ_2 表示 101°C 与 101.325kPa 时气态水的化学位, μ_3 表示 98°C 与 101.325kPa 时液态水的化学位,则水在三个状态下化学位的大小顺序为 (\quad) 。

4. 一定温度时,稀溶液体系中,溶液上方溶剂的饱和蒸气压随溶液中溶质浓度的增加而 (\quad) 。

5. 某液体物质的饱和蒸气压与温度的函数关系为 $\ln p = A + BT^{-1}$ (A, B 均为常数),则该物质的摩尔汽化热为 (\quad) 。

6. A 物质与水可分别形成含一分子,三分子和七分子的固体含水盐,该体系的组分数为 (\quad) ;一定压力下,固体 A 与含 A 的水溶液体系中最多允许有 (\quad) 种含水盐与其平衡共存。

7. 1mol 某物质经绝热可逆过程,使体系的温度由 298K 变到了 398K ,体系的焓变为 a ,已知该物质在 298K 时的摩尔焓为 b ,则该过程的 Gibbs 自由能改变量为 (\quad) 。

8. 反应 $\text{Zn}(\text{s}) + \text{Cu}^{2+}(\text{a}_1) = \text{Zn}^{2+}(\text{a}_2) + \text{Cu}(\text{s})$,设计成电池的表示式为 (\quad) 。

9. 以银为电极通电子于氰化银钾($\text{KCN} + \text{AgCN}$)溶液时,银(Ag)在阴极上析出。每通过 1mol 电子的电量,阴极部失去 1.40mol 的 Ag^+ 和 0.80mol 的 CN^- ,得到 0.6mol 的 K^+ ,则负离子迁移数为 (\quad) 。

10. 在一定温度和大气压下,水平液面的附加压力 $\Delta p (\quad) 0$;凹液面的附加压力 $\Delta p (\quad) 0$;凸液面的附加压力 $\Delta p (\quad) 0$ 。

11. 对带负电荷的溶胶体系进行聚沉时,有机物、 NaCl 和 MgSO_4 三种物质的聚沉能力从大到小的依次顺序为 (\quad) 。

12. 一定 T, V 下,反应 $2\text{A}(\text{g}) = \text{A}_2(\text{g})$, $\text{A}(\text{g})$ 反应掉四分之三所需的时间是反应一半所需时间的 2.0 倍,则此反应的反应级数 $n = (\quad)$ 。

13. 在一定温度下,液相反应 $\text{A} + 2\text{B} \rightarrow \text{D}$ 的速率常数 $k_A = 42.5\text{min}^{-1}$,则 C_A 从 $2.0\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ 变到 $0.50\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ 所需的时间为 t_1 ,从 $0.4\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ 变化到 $0.1\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ 所需的时间为 t_2 ,两者之比 $t_2/t_1 = (\quad)$ 。

14. 双原子分子理想气体的平动对恒容摩尔热容的贡献为 (\quad) 。

15. 理想气体分子的平动配分函数为 $q = (2\pi mkT/h^2)^{3/2} \cdot V$,则 1mol 该分子所产生的平动熵为 (\quad) 。

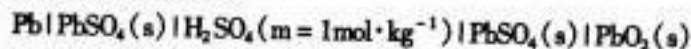
二、(6分) 101.325kPa 及 298K 下,将 0.5mol A 于 0.5mol B 所形成的理想溶液与 1.0mol

download from <http://www.xueba.com>

5. C 为常数)的多方可逆过程后,温度变到了 273K,求该过程的 W 、 Q 、 ΔU 及 ΔH 。

四、(6分) 101.325kPa 压力下,反应 $A(l) + B(l) = C(l) + D(l)$, 四个物质的混合物为理想溶液, 298K 时的热力学平衡常数为 1.8×10^{-4} ; 308K 时该反应的热力学平衡常数为 3.5×10^{-2} , 设该反应的 $\Delta C_p = 0$, 求反应的 ΔH 与 ΔS 。

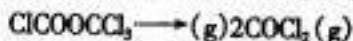
五、(8分) 铅酸蓄电池可表示为



在 $0 \sim 60^\circ\text{C}$ 时的温度范围内, 此电池的电动势与温度 $t(^\circ\text{C})$ 的关系为 $E = 1.917 + 5.61 \times 10^{-5}t + 1.08 \times 10^{-8}t^2$, 25°C 时电池的标准电动势 $E^\ominus = 2.041\text{V}$;

1. 写出放电 2 法拉第时的电极反应及电池反应;
2. 计算电动势的温度系数及 25°C 时电池反应的 $\Delta_r S_m$ 及 $\Delta_r H_m$;
3. 计算 H_2SO_4 的平均活度系数。

六、(8分) 在密闭容器中放入双光气进行双光气的分解反应:

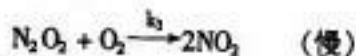
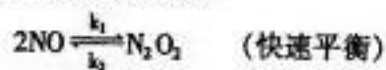


280°C 时测得不同反应时刻体系的总压如下:

t (秒)	0	500	800	1300	1500	∞
$P_{\text{总}}$ (Pa)	2000	2520	2760	3066	3306	4000

求反应级数及分解反应的速率常数。

七、(6分) 恒温、恒容气相反应的机理为:



以上三基元反应的活化能分别为 80、200、80kJ/mol。

1. 求反应的动力学微分方程 $-d[\text{O}_2]/dt = ?$
2. 当反应体系的温度升高时, 反应速率将如何变化?

八、选择与填空(10分)

1. H^{79}Br 的在远红外区给出一系列距离间隔为 16.94cm^{-1} 的谱线, 其转动常数 $B(\text{cm}^{-1})$ 为()。

A. 8.47 B. 16.94 C. 33.88 D. 67.76

2. 下列分子中磁矩最大的是()。

A. Li_2 B. C_2 C. B_2 D. NO

3. 对于双原子分子 CO , 如果分子轨道中的一个电子有 80% 的时间在 C 原子轨道上, 20% 的时间在 O 原子轨道上, 描述该分子轨道归一化的形式为()。

A. $\Psi = 0.8\phi_c + 0.2\phi_o$ B. $\Psi = 0.2\phi_c + 0.8\phi_o$
C. $\Psi = 0.894\phi_c + 0.448\phi_o$ D. $\Psi = 0.64\phi_c + 0.04\phi_o$

4. 交叉式二茂铁属于的点群是()。

- A. C_{5v} B. C_{5h} C. D_{5h} D. D_{5d}

5. 环丙烯正离子、环丙烯基、环丙烯负离子三者的稳定性次序是()。

- A. 正离子 < 环丙烯基 < 负离子 B. 正离子 > 环丙烯基 > 负离子
C. 正离子 = 环丙烯基 < 负离子 D. 正离子 = 环丙烯基 > 负离子

6. 品优波函数的必备条件是_____，_____，_____。

7. CO_2 有_____个简正振动方式，其中_____个为红外活性，_____个为拉曼活性。

九、计算题(10分)

FeS_2 (黄铁矿)晶体具有与 $NaCl$ 相似的晶体结构, Fe 和 S_2 分别处在与 Na^+ 和 Cl^- 相当位置上, 实验测得 FeS_2 密度为 $5.01g \cdot cm^{-3}$ 、 Fe 和 S 的原子量分别为 55.85 和 32.07。

1. 指出 100、110、111、200、210、211、220、222 衍射中哪些是允许的?
2. 计算晶胞参数 a ;
3. 计算以 $CuK\alpha(\lambda = 154.2pm)$ 射线照射该晶体时的最小 Bragg 角。

十、计算题(10分)

1. 计算 He 原子基态的总能量;
2. 计算 He 原子激发态 $1S^1 2P^1$ 的轨道角动量;
3. 写出基态 $He(1S^2)$ 和激发态 $He(1S^1 2P^1)$ 的光谱项和光谱支项, 并指出从基态到激发态哪些谱项之间电子跃迁是允许的。