

一、判断题（每题 1 分，共 15 分）

1. 理想气体状态方程式，不仅适用于单一组分的理想气体，也适用于理想气体混合物。（T）
2. 当温度变化时， $\Delta_f G_m^\ominus(\text{NaCl}, \text{s})$ 的改变量比 $S_m^\ominus(\text{NaCl}, \text{s})$ 的改变量小。（F）
3. 反应的 $\Delta_r G_m^\ominus$ 越小，反应速率越大。（F）
4. 因为 $E^\ominus(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) > E^\ominus(\text{Fe}^{2+}/\text{Fe})$ ，所以 FeCl_3 不能与单质铜反应。（F）
5. ds 区元素的原子价层电子构型均为 $(n-1)d^{10}ns^{1\sim 2}$ ，都是金属元素。（T）
6. 色散力存在于一切分子之间。（T）
7. 在 298 K 下， $S_m^\ominus(\text{H}_2, \text{g}) = 0 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。（F）
8. 在相同温度下，若反应 A 的 K_A^\ominus 大于反应 B 的 K_B^\ominus ，则反应 A 的 $\Delta_r G_m^\ominus$ 值大于反应 B 的 $\Delta_r G_m^\ominus$ 值。（F）
9. 温度升高，任何反应的熵变都增大。（F）
10. 对可逆反应： $\text{C}(\text{s}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}(\text{g}) + \text{H}_2(\text{g})$ ， $\Delta_r H_m^\ominus > 0$ ，升高温度，使正反应速率增大，逆反应速率减小，平衡向右移动。（F）
11. 金属活动顺序是按 $E^\ominus(\text{M}^{n+}/\text{M})$ 由小到大排列的。（T）
12. 若反应二的各化学计量数均为反应一的 1/2，则 $E_2^\ominus = \frac{1}{2} E_1^\ominus$ 。（F）
13. 价键理论可以预测共价化合物的分子结构。（F）
14. 通常含氧酸根的氧化能力随溶液的 pH 值减小而增强。（T）
15. 在某氧化还原反应方程式中，等号两边各元素的原子数分别相等，则该化学方程式必定是已经配平。（F）

二、选择题（每题 2 分，共 30 分）

1. 在热力学温度为 0 K 时，石墨的标准摩尔熵（A）
A、等于零 B、大于零 C、小于零 D、不确定

2. 恒温下, 下列反应中 $\Delta_r S_m^\ominus$ 为负值的是 (C)
- A、 $2\text{AgNO}_3(\text{s}) \rightarrow 2\text{Ag}(\text{s}) + 2\text{NO}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g})$
 B、 $\text{CaCO}_3(\text{s}) \rightarrow \text{CaO}(\text{s}) + \text{CO}_2(\text{g})$
 C、 $2\text{Na}(\text{s}) + \text{Cl}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NaCl}(\text{s})$
 D、 $\text{H}_2(\text{g}) + \text{F}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{HF}(\text{g})$
3. 已知反应 $2\text{C}_2\text{H}_4(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{CH}_3\text{CHO}(\text{aq})$ 的 $\Delta_r G_m^\ominus(1)$, $\text{C}_2\text{H}_4(\text{g}) + \frac{1}{2}\text{O}_2(\text{g}) \rightarrow \text{CH}_3\text{CHO}(\text{aq})$ 的 $\Delta_r G_m^\ominus(2)$, 则在相同温度时, 二者的关系是 (D)
- A、 $\Delta_r G_m^\ominus(1) = \Delta_r G_m^\ominus(2)$; B、 $\Delta_r G_m^\ominus(1) = [\Delta_r G_m^\ominus(2)]^2$;
 C、 $\Delta_r G_m^\ominus(1) = \frac{1}{2}\Delta_r G_m^\ominus(2)$; D、 $\Delta_r G_m^\ominus(1) = 2\Delta_r G_m^\ominus(2)$ 。
4. 298 K时下列物质的 $\Delta_f H_m^\ominus$ 不为零的是 (A)
- A、Fe(l) B、 P_4 (白磷, s) C、Ne(g) D、 $\text{Cl}_2(\text{g})$
5. 某基元反应 $2\text{A}(\text{g}) + \text{B}(\text{g}) \rightarrow \text{C}(\text{g})$, 将 2 mol A(g)和 1 mol B(g)放在 1 L 容器中混合, 则初始反应速率与 A、B 都消耗一半时的反应速率之比为 (C)
- A、1/4 B、4 C、8 D、1
6. 在标准 $\text{Ag}_2\text{CrO}_4/\text{Ag}$ 电极中, 下列离子浓度正确的是 (B)
- A、 $c(\text{Ag}^+) = 1.0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ B、 $c(\text{CrO}_4^{2-}) = 1.0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$;
 C、 $c(\text{H}^+) = 1.0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ D、 $c(\text{K}^+) = 1.0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$
7. 下列电极电势最小的是 (B)
- A、 $E^\ominus(\text{Ag}^+/\text{Ag})$ B、 $E^\ominus(\text{AgI}/\text{Ag})$
 C、 $E^\ominus(\text{AgCl}/\text{Ag})$ D、 $E^\ominus(\text{AgBr}/\text{Ag})$
8. 根据 $E^\ominus(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = 0.771\text{V}$, $E^\ominus(\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}) = -0.44\text{V}$, $E^\ominus(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) = 0.337 \text{ V}$, 判断下列各对物质不能共存的是 (B)
- A、 Cu^{2+} 和 Fe^{2+} B、 Fe^{3+} 和 Cu
 C、 Fe^{3+} 和 Cu^{2+} D、 Fe^{2+} 和 Cu

9. 25 °C时,在原电池: $(-)\text{Pt}|\text{H}_2(p^\ominus)|\text{H}_2\text{SO}_4(0.50 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1})||\text{CuSO}_4(0.010 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1})|\text{Cu}(+)$ 右边半电池中分别加入等体积的下列溶液,能引起电池电动势增加的是 (C)
- A、 $0.010 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ CuSO}_4$ B、 $0.10 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ Na}_2\text{S}$
C、 $2.0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ CuSO}_4$ D、 $0.010 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ H}_2\text{SO}_4$
10. 已知一给定反应的 $\Delta_r G_m^\ominus$, 则下列各项中不能确定的是 (D)
- A、标准状态下自发反应的方向
B、同一温度下的标准平衡常数
C、标准状态下该反应可以产生的最大有用功
D、任意状态下的反应方向
11. 原电池: $(-)\text{Pt}|\text{H}_2(100 \text{ kPa})|\text{HCl}(\text{aq})||\text{CuSO}_4(\text{aq})|\text{Cu}(+)$ 的电动势与下列物理量无关的是 (D)
- A、温度 B、盐酸浓度 C、 CuSO_4 浓度 D、铜电极的面积
12. 由反应 $3\text{A}^{2+} + 2\text{B} \rightleftharpoons 3\text{A} + 2\text{B}^{2+}$ 构成原电池, 该电池在标准状态时的电动势为 1.8 V。在某一浓度时其电动势为 1.6 V, 则此时该反应的 $\Delta_r G_m$ 等于 (C)
- A、 $-6 \times 1.8 \times 96.485 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ B、 $-3 \times 1.8 \times 96.485 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
C、 $-6 \times 1.6 \times 96.485 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ D、 $-3 \times 1.6 \times 96.485 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
13. 下列关于杂化轨道的叙述中正确的是 (B)
- A、凡是中心原子采用 sp^3 杂化轨道成键的分子, 都具有正四面体的空间构型
B、 sp^2 杂化轨道是由同一原子的 1 个 ns 轨道和 2 个 np 轨道混合组成的三个新的原子轨道
C、凡 AB_3 型分子, 中心原子都采用 sp^3 杂化轨道成键
D、 CH_4 分子中的 sp^3 杂化轨道是由 H 原子的 $1s$ 原子轨道和碳原子 3 个 p 轨道混合组成的
14. 下列各原子轨道能量最高的是 (C)
- A、 $\Psi_{2,1,1}$ B、 $\Psi_{3,1,1}$ C、 $\Psi_{3,2,1}$ D、 $\Psi_{4,0,0}$

15. 下列 AB₂ 型分子中, 具有直线形构型的是 (A)

A、CS₂

B、NO₂

C、OF₂

D、SO₂

三、填空题(每空 2 分, 共 30 分)

1. 已知反应 $3\text{H}_2(\text{g}) + \text{N}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{NH}_3(\text{g})$ 的 $\Delta_r G_m^\ominus = -33.0 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, 则 $\Delta_f G_m^\ominus(\text{NH}_3, \text{g}) = \underline{16.5} \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$, $\Delta_f G_m^\ominus(\text{N}_2, \text{g}) = \underline{0} \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。
2. 反应: $\text{NO}(\text{g}) + \text{O}_3(\text{g}) \rightleftharpoons \text{NO}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g})$ 的 $\Delta_r H_m < 0$ 。若 p, V 不变, 降低温度, 则正反应速率常数将 降低; 正反应速率将 降低; 反应的标准平衡常数将 增大; 平衡将 向右 移动。
3. 半反应 $2\text{H}^+ + 2\text{e} \rightarrow \text{H}_2$ 的 $E^\ominus = 0.00 \text{ V}$, 298 K 下保持 $p(\text{H}_2) = 100 \text{ kPa}$, 则纯水中 $E(\text{H}^+/\text{H}_2) = \underline{-0.414} \text{ V}$; 若要使纯水中 $E(\text{H}^+/\text{H}_2)$ 增大, 则氢气的分压应 降低。
4. 在 HF、OF₂、H₂O、NH₃ 等分子中, 键的极性最强的是 HF, 最弱的是 OF₂。
5. 酸碱质子理论认为 能给出质子的分子或离子 是酸, 能与质子结合的分子或离子 是碱。
6. 向 Al₂(SO₄)₃ 和 CuSO₄ 混合溶液中放入铁钉, 将生成 Cu 和 Fe²⁺。
7. 1s 轨道对应的波函数为 $\Psi_{1,0,0}$ 。

四、简答题 (5 分)

试简述核外电子排布需遵循的规则。

答:

1. **Pauli 不相容原理:** 在同一个原子中没有 4 个量子数完全相同的电子。也即: 同一原子轨道仅可容纳 2 个自旋相反的电子。
2. **能量最低原理:** 在不违背不相容原理的前提下, (基态原子的) 核外电子在各原子轨道上的排布方式应使整个原子能量处于最低状态。

3. **Hund 规则**：电子在能量相同的轨道（简并轨道）上分布时，总是尽可能以自旋相同的方向分占不同的轨道。这样的电子填入方式可使原子的能量最低。

备用题：试简述 Pauli 不相容原理及其意义。

五、计算题（每题 5 分，共 20 分）

- 在某温度下，发生下列反应： $\text{N}_2\text{O}_4(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NO}_2(\text{g})$ 。平衡混合物的总压为 $1.00 \times 10^5 \text{ Pa}$ ， NO_2 的分压为 $5.00 \times 10^4 \text{ Pa}$ 。
 - 求此温度下的标准平衡常数 K^\ominus ；【 $K^\ominus = 0.5$ 】
 - 如果使系统体积缩小，平衡时总压为 $2.00 \times 10^5 \text{ Pa}$ ，求此时各组分的分压。【 $p(\text{NO}_2) = 7.91 \times 10^4 \text{ Pa}$; $p(\text{N}_2\text{O}_4) = 1.21 \times 10^5 \text{ Pa}$ 】
- 已知合成氨反应 $\text{N}_2(\text{g}) + 3\text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NH}_3(\text{g})$ 的 $\Delta H^\ominus(298 \text{ K}) = -91.8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ， $\Delta S^\ominus(298 \text{ K}) = -0.198 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 - 分别计算 298 K 及 673 K 下，合成氨反应的 ΔG^\ominus 和 K^\ominus ；
【 $\Delta G^\ominus(298 \text{ K}) = -32.8 \text{ kJ mol}^{-1}$; $K^\ominus(298 \text{ K}) = 5.8 \times 10^5$ 】
【 $\Delta G^\ominus(673 \text{ K}) = 41.5 \text{ kJ mol}^{-1}$; $K^\ominus(673 \text{ K}) = 5.9 \times 10^{-4}$ 】
 - 工业合成氨多在高温下进行，为什么？
高温条件下，反应速率更快；催化剂活性更高；为提高转化率，可以通过加压，分离产物等方法使平衡向右移动。
- 已知： $E^\ominus(\text{MnO}_4^-/\text{Mn}^{2+}) = 1.51 \text{ V}$ ，试计算， MnO_4^- 和 Mn^{2+} 浓度均为 1 mol/L ，
 - $\text{pH} = 1$ 时的 $E(\text{MnO}_4^-/\text{Mn}^{2+})$ ；【 $E = 1.51 - 0.0592 \times \frac{8}{5} \text{ pH}$; 1.42 V 】
 - $\text{pH} = 4$ 时的 $E(\text{MnO}_4^-/\text{Mn}^{2+})$ 。【 $E = 1.51 - 0.0592 \times \frac{8}{5} \text{ pH}$; 1.13 V 】
- 已知 298 K 时， $E^\ominus(\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}) = 0.337 \text{ V}$ ， $E^\ominus(\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}) = -0.44 \text{ V}$ 。计算在 $0.10 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{ Cu}^{2+}$ 溶液中加入足量铁粉，反应达到平衡后，溶液中 Cu^{2+} 的浓度。【 $K^\ominus = 1.8 \times 10^{26}$; $c(\text{Cu}^{2+}) = 5.6 \times 10^{-28} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 】