

1.

某理想气体在101.325 kPa的外压下，从10 dm³膨胀到16 dm³，吸热126 J，则该气体ΔU等于？

选项：

- (A) -284 J
- (B) 842 J
- (C) -482 J
- (D) 482 J

2. 1 mol的H₂O(l)在373 K下经历两个不同的过程：(1) 当压力保持不变时，水蒸发；(2) 当压力保持不变时，水蒸。以下关于两个过程的正确描述是哪一项？

- (A) $W_1 > W_2$, $Q_1 > Q_2$, $\Delta U_1 > \Delta U_2$
 - (B) $W_1 < W_2$, $Q_1 < Q_2$, $\Delta U_1 < \Delta U_2$
 - (C) $W_1 > W_2$, $Q_1 < Q_2$, $\Delta U_1 = \Delta U_2$
 - (D) $W_1 < W_2$, $Q_1 > Q_2$, $\Delta U_1 > \Delta U_2$
-

3. 对于一个理想气体在绝热膨胀过程中的变化，以下哪一项是正确的关于系统、环境和总系统的熵变化的关系？

- (A) $\Delta S_{\text{sys}} > 0$, $\Delta S_{\text{sur}} = 0$, $\Delta S_{\text{tot}} > 0$
 - (B) $\Delta S_{\text{sys}} < 0$, $\Delta S_{\text{sur}} = 0$, $\Delta S_{\text{tot}} < 0$
 - (C) $\Delta S_{\text{sys}} > 0$, $\Delta S_{\text{sur}} < 0$, $\Delta S_{\text{tot}} > 0$
 - (D) $\Delta S_{\text{sys}} < 0$, $\Delta S_{\text{sur}} > 0$, $\Delta S_{\text{tot}} > 0$
-

4. 对于一摩尔理想气体，在压力、体积和温度变化的过程中，熵的变化是由下列公式给出的。以下哪个公式正确表示了此过程中熵的变化？

- (A) $\Delta S = nC_p \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + nR \ln\left(\frac{P_2}{P_1}\right)$
- (B) $\Delta S = nC_v \ln\left(\frac{P_2}{P_1}\right) + nC_p \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)$
- (C) $\Delta S = nC_v \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + nR \ln\left(\frac{V_2}{V_1}\right)$
- (D) $\Delta S = nC_p \ln\left(\frac{T_2}{T_1}\right) + nR \ln\left(\frac{P_2}{P_1}\right)$

5. 1 mol理想气体从状态1 ($T = 273\text{ K}$, $P_1 = 200.0\text{ kPa}$) 到状态2 ($P_2 = 400.0\text{ kPa}$) , 在体积恒定的情况下, 计算其焓变 (ΔH) 为多少?

- (A) -17.02 kJ
- (B) -10.21 kJ
- (C) 17.02 kJ
- (D) 10.21 kJ

6. 将5 mol $\text{H}_2(\text{g})$ 与4 mol $\text{Cl}_2(\text{g})$ 混合, 生成2 mol $\text{HCl}(\text{g})$ 。根据下列计算方法, 该反应的速率等于?

- (A) 1 mol
 - (B) 2 mol
 - (C) 4 mol
 - (D) 5 mol
-

7. 一定量理想气体向真空膨胀, 体积从 V_1 变到 V_2 , 以下表示其熵变化的公式是?

- (A) $\Delta S = 0$
 - (B) $\Delta S = -nR \ln \left(\frac{V_2}{V_1} \right)$
 - (C) $\Delta S = nR \ln \left(\frac{V_2}{V_1} \right)$
 - (D) 无法计算
-

8. 理想气体在恒温条件下, 由 p_1, V_1 膨胀到 p_2, V_2 , 该过程的 ΔA 与 ΔG 的关系为?

- (A) $\Delta A > \Delta G$
- (B) $\Delta A < \Delta G$
- (C) $\Delta A = -\Delta G$
- (D) 视过程而定

9. 已知某反应的 $\Delta_r H_m$ 的值不随温度而变, 且 $\left[\frac{\partial \Delta_r H_m}{\partial T} \right]_P = 0$, 当反应温度降低时, 反应的熵变 $\Delta_r S_m$ 的值为?

- (A) 降低
- (B) 增大
- (C) 不变
- (D) 无法判断

10. 下列偏微分中，不是化学势表示式的是？

- (A) $\left(\frac{\partial H}{\partial n_C}\right)_{S,T,n_B \neq C}$
- (B) $\left(\frac{\partial U}{\partial n_C}\right)_{S,V,n_B \neq C}$
- (C) $\left(\frac{\partial G}{\partial n_C}\right)_{T,P,n_B \neq C}$
- (D) $\left(\frac{\partial A}{\partial n_C}\right)_{T,P,n_B \neq C}$

11. 在一定的 T, P 条件下，化学反应达到平衡时，以下不一定正确的关系式是？

- (A) $\sum_B \nu_B \mu_B = 0$
- (B) $\Delta_r G_m = 0$
- (C) $\Delta_r G_m^\theta = -RT \ln K^\theta$
- (D) $\Delta_r H_m^\theta = 0$

12. 对于标准平衡常数 K^θ ，以下正确的函数式是？

- (A) $K^\theta = f(T, p)$
 - (B) $K^\theta = f(T, p, T_B)$
 - (C) $K^\theta = f(T)$
 - (D) $K^\theta = f(p)$
-

13. 在一定温度下，有解离反应 $\text{Ag}_2\text{O}(s) = 2\text{Ag}(s) + \frac{1}{2}\text{O}_2(g)$ ，已知 $K^\theta = a$ ，则 $\text{Ag}_2\text{O}(s)$ 在该温度下的解离压力 p 为？

- (A) $p = \frac{a}{p_0}$
- (B) $p = a \cdot p^\theta$
- (C) $p = a^2 \cdot p^\theta$
- (D) $p = \sqrt{a} \cdot p^\theta$

14. 1000 K时，反应 $\text{Ni}(s) + \text{H}_2\text{O}(g) = \text{NiO}(s) + \text{H}_2(s)$ 的标准平衡常数 $K_p = 0.0059$ ，设气体均为理想气体，当 $\text{H}_2\text{O}(g)$ 和 $\text{H}_2(g)$ 的分压相等时，反应趋向进行的方向为？

- (A) 正向进行
- (B) 逆向进行
- (C) 处于平衡状态
- (D) 无法判断

15. 人的血液中, $[H_2CO_3] = 1.25 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$ (含 CO_2) , $[HCO_3^-] = 2.5 \times 10^{-2} \text{ mol/L}$, 设平衡条件在体温 (37°C 时 $[H_2CO_3]$ 的 $pK_a = 6.1$, 与血液的 pH 值是?

- (A) 6.8
- (B) 7.0
- (C) 7.2
- (D) 7.4

16. 准静态过程()可逆过程。

- (A) 等价于
- (B) 一定不是
- (C) 可能不是
- (D) 其他三个答案都不对

17. 关于热力学第一定律适用条件, ()是最合适选择。

- (A) 封闭系统
- (B) 无相变封闭系统
- (C) 无化学反应封闭系统
- (D) 无相变也无化学反应的封闭系统

18. 两个系统都由 Ar 理想气体构成。实验测得两个系统温度相等。那么, 两个系统 () 成立。

- (A) 熵相等
- (B) 热能相等
- (C) 基态能相等
- (D) 其他三个都不对

19. 对于玻耳兹曼公式 $S = k \ln W$, ()是最合适选择。

- (A) 适用于任意宏观状态
- (B) 适用于平衡态
- (C) 适用于最可几分布
- (D) 适用于任意微观结构

20.

$\Delta G \leq 0$ 作为热力学第二定律, 除要求 $dW_{\text{非}} = 0$ 外, 还需要()。

- (A) 定压定温
- (B) 定压定温、 n 恒定
- (C) $P_{\text{终}} = P_{\text{始}}$ 、 $T_{\text{终}} = T_{\text{始}}$
- (D) $P_{\text{终}} = P_{\text{始}}$ 、 $T_{\text{终}} = T_{\text{始}}$ 、 n 恒定

1. 将 1 mol H₂O(g) 从 373 K, 100 kPa 的始态, 小心等温压缩, 在没有灰尘等凝聚中心存在下, 得到了 373 K, 200 kPa 的介稳水蒸气, 但不久介稳水蒸气全变成了液态水, 即



已知在该条件下, 水的摩尔蒸发焓为 46.02 kJ mol⁻¹, 水的密度为 1000 kg m⁻³。设气体为理想气体, 液体体积受压力的影响可忽略不计。

(1) 计算该过程的 ΔH 和 ΔS ;

(2) 用合适的判据证明在 263 K, 100 kPa 下, H₂O(s) 比 H₂O(l) 更稳定。

2. (20 分)

对于 Haber-Bosch 反应 $\frac{1}{2} \text{N}_2(\text{g}) + \frac{3}{2} \text{H}_2(\text{g}) \leftrightarrow \text{NH}_3(\text{g})$, 所涉及的各物质的摩尔热容量可用方程 $C_p^\circ = \alpha + \beta T$ 表述, 其中系数 α 和 β 如下表所示。

| | $\alpha / \text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ | $\beta / \text{J K}^{-2} \text{ mol}^{-1}$ |
|---------------------|---|--|
| N ₂ (g) | 28.58 | 3.77×10^{-3} |
| H ₂ (g) | 27.28 | 3.26×10^{-3} |
| NH ₃ (g) | 29.75 | 25.1×10^{-3} |

- (a) 对于这个反应, 用反应物和产物的热容量写出 $\Delta_r C_p^\circ$ 的表达式。使用上表中的数据以 $\Delta_r C_p^\circ = A + BT$ 的形式表示 $\Delta_r C_p^\circ$, 并给出 A 和 B 的值。
- (b) 若已知温度 T_1 时反应的焓变为 $\Delta_r H(T_1)$, 根据 $\Delta_r C_p^\circ = A + BT$ 和 $\Delta_r H(T_1)$, 给出温度 T_2 时反应焓变 $\Delta_r H(T_2)$ 的表达式。
- (c) 使用(b)得出的表达式, 计算 1000 K 时 NH₃(g) 的标准生成热 ($\Delta_f H$)。已知 298 K 时, NH₃(g) 的 $\Delta_f H$ 值为 -46.1 kJ mol⁻¹。
- (d) 298 K 时 NH₃(g), H₂(g) 和 N₂(g) 的标准熵分别是 192.5 J K⁻¹ mol⁻¹, 130.7 J K⁻¹ mol⁻¹, 和 191.6 J K⁻¹ mol⁻¹。由上一问得到的数据, 计算反应温度从 298 K 升高 1000 K 过程中 Haber-Bosch 反应的标准熵变。
- (e) 计算 Haber-Bosch 反应在 1000 K 时的标准 Gibbs 自由能变化和相应的平衡常数。
- (f) 当反应容器的体积不变且 N₂ 和 H₂ 初始分压分别为 1.0 bar 和 3.0 bar 时, 计算 1000 K 下 NH₃ 的平衡压力。