化学热力学自测题及答案

**一、判断题：**

1. 纯单质的、和皆为零。……………………………………………………（ ）

2. 标准摩尔生成焓就是在温度和压力下进行反应的焓变。…………………………（ ）

**二、单项选择题：**

1. 下列函数均为状态函数的是 （ ）

A. H，G，U B. U，S，Q

C. G，W，U D. G，S，W

2. 下列反应中，与产物的相同的是 （ ）

A.  B. 

C.  D. 

3. 下列结论正确的是 ( )

A. 当△H>0，△S<0时，反应自发进行

B. 当△H<0，△S>0时，反应自发进行

C. 当△H<0，△S<0时，任何温度下均不自发进行

D. 当△H>0，△S>0时，任何温度下均不自发进行

**三、计算题：**

1. 工业上从粗TiO2（金红石）矿石中提取TiCl4（l）的反应如下：

TiO2(s) + 2Cl2(g) == TiCl4(l) + O2(g)

*Δf Hm***Θ**/ kJ·mol-1 -912.00 0 -750.20 0

*S* m**Θ** / J·mol-1·K-1 50.25 222.96 252.7 205.03

（1） 计算该反应在298K时的标准反应热效应及吉布斯函数变；

（2） 如假设各物质的焓变和熵变不随温度变化，试计算该反应能自发进行的温度；

（3） 为了使反应能在更温和的条件下进行，通常使用石墨（*Δf Hm*Θ = 0 kJ/mol, *S* mΘ = 5.74 J·mol-1·K-1）在氧气中燃烧生成CO2(g)（*ΔfHm*Θ = -393.14 kJ/mol, *S*mΘ = 213.64 J·mol-1·K-1）的反应与之进行耦合，试写出耦合后的热化学反应方程式；

（4） 新反应路径要自发进行对反应温度有什么要求?

**练习题参考答案：**

**一、判断题：**

1×, 2×

**二、单项选择题：**

1 A，2 D，3 B，

**三、计算题：**

1. （1）*ΔrHm***Θ =** -750.20-(-912.00) = 161.80 kJ·mol-1

*ΔrS*m**Θ =** 252.7 + 205.03 - 50.25 -2×222.96 = -38.44 J·mol-1·K-1

*ΔrGm***Θ =** *Δr Hm*Θ - T×*ΔrS*mΘ = 161.80 -298 × (-38.44)/1000=173.25 kJ·mol-1

(2) 要使反应自发进行，*Δr Gm***Θ< 0，** 即*Δr Hm*Θ - T×*ΔrS* mΘ**<**0

由于该反应是吸热，熵减反应，因此*Δr Gm*Θ恒大于零，即该反应在任何温度下都不能自发进行。

（3）耦合后的新反应为

TiO2(s) + 2Cl2(g) + C（石墨）= TiCl4(l) + CO2(g)

（4） *ΔrHm***Θ =** -750.20 +（-393.14）- (-912.00) = -231.34 kJ·mol-1

*ΔrS*m**Θ =** 252.7 + 213.64 - 50.25 -2×222.96-5.74 = -35.57 J·mol-1·K-1

*ΔrGm***Θ =***ΔrHm*Θ - T×*ΔrS*mΘ = -231.34 –T × (-35.57)/1000 **<** 0

则有T < 6503.80K 即只要反应温度低于这个温度，反应都可以自发进行。