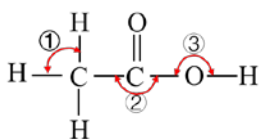


一、选择题 (10 分, 共 5 题, 每题 2 分, 每题中只有一个正确答案)

1. 在 BrCH=CHBr 分子中, C-Br 键的成键轨道是 ()。
A. sp-p B. $\text{sp}^2\text{-s}$ C. $\text{sp}^2\text{-p}$ D. $\text{sp}^3\text{-p}$
2. 一定温度下, 由 A 和 B 两种液体组成的理想溶液达到气液相平衡, 该温度下纯 A 和纯 B 的饱和蒸气压分别为 P_A° 和 P_B° , x_A 、 x_B 分别为溶液中 A 和 B 的摩尔分数, y_A 、 y_B 分别为蒸气相中 A 和 B 的摩尔分数, 若 $P_A^\circ > P_B^\circ$, 则 ()。
A. $x_A > x_B$ B. $y_A > y_B$ C. $x_A > y_B$ D. $y_A > x_A$
3. SO_2 、 SF_4 和 XeF_2 中属于极性分子的是 ()。
A. SO_2 、 SF_4 和 XeF_2 B. SO_2 和 XeF_2 C. SO_2 和 SF_4 D. SO_2
4. 如下图所示, 乙酸分子①、②和③处键角的近似值为 ()。



- A. 90° 、 180° 、 180° B. 109.5° 、 120° 、 109.5°
C. 109.5° 、 120° 、 180° D. 109.5° 、 180° 、 180°
5. 下列说法中错误的有几个 ()。
(1) 相图中三相点一定是气液固三相的平衡点;
(2) 298 K 下压缩氧气, 当压强足够大, 氧气就能液化, 氧气也发生了相变;
(3) 体系总是朝着熵增加的方向自发进行;
(4) 碱土金属氧化物的熔点比同周期的碱金属氧化物的熔点低。
A. 1 个 B. 2 个 C. 3 个 D. 4 个

二、填空题 (10 分, 共 5 题, 每题 2 分)

1. 常温常压下将少量 NH_4NO_3 固体溶解于水中, 经过一段时间后固体完全溶解, 溶液温度下降, 则该过程中体系的 ΔH _____ 0, ΔS _____ 0。(填 “<”、“=” 或 “>”)
2. 基态 Cu 、 Cu^+ 和 Zn 中, 有顺磁性的是 _____; S 和 S^{2-} 中, 半径较大的是 _____。
3. 将质量比为 2:1 的苯甲酸分别溶于相同质量的乙醇和苯中, 得到稀溶液的沸点分别升高了 1.15 K 和 1.39 K, 则乙醇和苯的摩尔沸点上升常数的比值为 _____。
4. 某个储气筒内压缩空气的温度为 303 K, 压强为 100 atm, 从储气筒内放出一半质量的气体后, 剩余气体的温度降到了 283 K, 则其压强为 _____ atm。
5. 已知: 主量子数 n 为 1、2 和 3 时, 对应的有效主量子数 n^* 分别为 1、2 和 3。根据 Slater 规则估算 Al 原子的第二电离能为 _____ a.u.。

三、问答题 (30 分, 共 6 题, 每题 5 分)

1. 根据价层电子对互斥理论, 写出下列各分子或离子的空间结构(给出名称), 并指出中心原子的杂化轨道类型。
(1) NH_3 (2) SnCl_2 (3) CS_2 (4) IF_2O_2^- (5) XeF_4

2. 某元素基态原子的 3d 轨道中有 6 个电子。
- (1) 写出该原子+2 价离子的基态电子构型。
 - (2) 该元素位于周期表中第几周期、第几族？
 - (3) 该元素所在周期有多少个元素？
 - (4) 该元素所在周期对应的能级组是什么？
 - (5) 假定该基态原子的第一、第二、第三和第四电离能分别为 I_1 、 I_2 、 I_3 和 I_4 ，比较 I_2 与 I_1 的差值($I_2 - I_1$)和 I_4 与 I_3 的差值($I_4 - I_3$)的大小。
3. 从 O_2 分子移走 1 个电子形成 O_2^+ 离子；在 O_2 分子上加 2 个电子则形成过氧离子 O_2^{2-} 。
- (1) 写出 O_2^+ 离子的基态电子构型；
 - (2) 估计 O_2 、 O_2^+ 和 O_2^{2-} 的键长增加的顺序；
 - (3) 指出 3 个物种中有顺磁性的物种；
 - (4) 比较 O_2 分子和 O 原子的第一电离能的大小；
 - (5) O_2^{2-} 离子的最高被占轨道(HOMO)是什么？
4. 一定量的理想气体在 500 K 从 100 kPa、4 L 等温可逆压缩到 500 kPa，计算该过程的 q 、 ΔU 、 ΔH 、 ΔS 和 ΔG 。

5. 已知有如下物质的化学热力学数据：

	$SiO_2(s)$	$H_2O(g)$	$HF(g)$	$SiF_4(g)$
$\Delta H_f^\ominus (kJ \cdot mol^{-1})$	-910.9	-241.8	-271.1	-1615.0
$S^\ominus (J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$	41.84	188.7	173.7	282.8

- (1) 工业上使用 $HF(g)$ 清洗硅片上的 $SiO_2(s)$ ，反应为： $SiO_2(s) + 4HF(g) = SiF_4(g) + 2H_2O(g)$ ，计算热力学标准态下该反应自发进行的温度范围。
 - (2) 温度为 1000 K， $HF(g)$ 、 $SiF_4(g)$ 和 $H_2O(g)$ 压强分别为 5.065 kPa、10.13 kPa 和 10.13 kPa 时，上述反应朝哪个方向自发进行？给出理由。
6. $CaCl_2(s)$ 的标准生成焓为 $-795.8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，金属 $Ca(s)$ 的升华焓为 $177.8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ， $Ca(g)$ 原子的第一电离能与第二电离能分别为 590 和 $1145 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ， $Cl-Cl$ 键的键焓为 $243.4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ， $Cl(g)$ 原子的电子亲和能为 $348.7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。画出计算 $CaCl_2(s)$ 离子晶体晶格能的波恩-哈勃循环图，并计算晶格能。

四、计算题（50 分，共 5 题，每题 10 分）

1. 用 MnO_2 作催化剂热分解 $KClO_3$ 制备氧气，在 293 K、99 kPa 时用排水集气法收集到饱和有水蒸气的氧气 1.50 L，已知 293 K 时水的饱和蒸气压为 2.34 kPa。
- (1) 计算该混合气体中氧气和水蒸气的分压及摩尔数；
 - (2) 计算将水蒸气除去以后，氧气在 273 K、101.3 kPa 条件下的体积；
 - (3) 判断在 293 K、99 kPa 条件下，是湿氧气的密度大还是干燥氧气的密度大？给出理由。

2. 已知甲醇的正常沸点为 338 K, 蒸发焓 ΔH_{vap} 为 $35.3 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, 摩尔质量为 $32.0 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。计算:

(1) 300 K 时甲醇的饱和蒸汽压;

(2) 300 K 时, 将 10.0 L 饱和有甲醇蒸气的空气从 100 kPa 压缩至 500 kPa, 此压缩过程中有多少克甲醇蒸气被凝聚为液体?

3. 已知金属钛属立方晶系, 晶胞边长为 328 pm, 钛的密度为 $4.50 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$, 原子量为 47.87。计算:

(1) 1 个晶胞中钛原子的个数;

(2) 钛原子的半径;

(3) 晶胞中钛原子的空间占有率。

4. 已知: 乙烷 $\text{C}_2\text{H}_6(\text{g})$ 、 $\text{CO}_2(\text{g})$ 和 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 的标准生成焓 ΔH_f° 分别为 $-84.7 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 、 $-393.5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 和 $-241.8 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, C-C 键、O=O 键、C=O 键和 O-H 键的键焓分别为 $344 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 、 $398 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 、 $725 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 和 $463 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。计算:

(1) 反应 $2\text{C}_2\text{H}_6(\text{g}) + 7\text{O}_2(\text{g}) = 4\text{CO}_2(\text{g}) + 6\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 的标准焓变。

(2) $\text{C}_2\text{H}_6(\text{g})$ 中 C-H 键的平均键解离焓。

(3) 400 K 时, 20.0 mol 乙烷在弹式热量计中燃烧生成 $\text{CO}_2(\text{g})$ 和 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$, 其热效应为多少?

5. 某非挥发性化合物的苯溶液 (可看作稀溶液), 该化合物与苯的质量比是 9:200。在一定温度和压强下, 将 0.1172 mol 的氮气缓慢地通过该溶液, 溶液减轻了 3.431 g; 在相同温度和压强条件下, 如果将相同量的氮气缓慢地通过纯苯, 纯苯减轻了 3.555 g。下列问题均忽略失去苯后溶液的浓度变化。已知: 苯的摩尔质量为 $78.1 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ 。

(1) 计算非挥发性化合物的相对分子量。

(2) 定性比较纯苯和苯溶液蒸发过程中蒸发焓(ΔH_{vap})的大小, 并给出理由。