

$$pV = nRT$$

$$pM = \rho RT$$

$$p_B = x_B \cdot p_T = n_B \frac{RT}{V}$$

$$\frac{u(A)}{u(B)} = \sqrt{\frac{\rho(B)}{\rho(A)}} = \sqrt{\frac{M(B)}{M(A)}}$$

$$\overline{E_k} = \frac{3}{2} kT$$

$$\underbrace{\left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)}_{\text{校正压力}} \underbrace{(V - nb)}_{\text{校正体积}} = nRT$$

$$\lg(p) = -\frac{\Delta_v H_m}{2.303RT} \cdot \frac{1}{T} + B$$

$$\lg\left(\frac{p_2}{p_1}\right) = \frac{\Delta_v H_m}{2.303R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

$$\sqrt{\overline{u^2}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$$

$$v\lambda = c$$

$$\frac{c}{v} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$$E = h\nu$$

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{mv}$$

$$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{2\pi m}$$

$$E_n = -13.6 \times \frac{Z^2}{n^2} \text{ eV}$$

$$E = -\frac{13.6 \times (Z^*)^2}{n^2} = -\frac{13.6 \times (Z - \sigma)^2}{n^2} \text{ eV}$$

$$\text{键级} = \frac{\text{成键电子总数} - \text{反键电子总数}}{2}$$

配位数与  $r^+/r^-$  之比相关:

0.225 ~ 0.414	4 配位	ZnS型
0.414 ~ 0.732	6 配位	NaCl型
0.732 ~ 1.000	8 配位	CsCl型

$$\mu = \sqrt{n(n+2)}$$

$$\text{CFSE} = (-4n_1 + 6n_2)Dq$$

## 一、单项选择题

1.  $27^{\circ}\text{C}$   $101.0\text{ kPa}$ 的 $\text{O}_2(\text{g})$ 恰好和 $4.0\text{L}$ ,  $127^{\circ}\text{C}$   $50.5\text{kPa}$ 的 $\text{NO}(\text{g})$ 反应生成 $\text{NO}_2(\text{g})$ , 则 $\text{O}_2(\text{g})$ 的体积为 (C)
- (A)  $1.5\text{ L}$  (B)  $3.0\text{ L}$   
(C)  $0.75\text{ L}$  (D)  $0.20\text{L}$
2. 扩散速率三倍于水蒸气的气体是 (B)
- (A)  $\text{He}$  (B)  $\text{H}_2$  (C)  $\text{CO}_2$  (D)  $\text{CH}_4$
3. 实际气体在下述哪种情况下接近理想气体 (B)
- (A) 低温和高压 (B) 高温和低压  
(C) 低温和低压 (D) 高温和高压

4. 多电子原子的能量E由什么决定 (B)

(A) 量子数n (B) 量子数 n和l

(C) 量子数 n, l, m (D) 量子数l

5. 下列哪项用量子数描述的电子亚层可以容纳的电子数最多 (B)

(A)  $n = 3, l = 2$  (B)  $n = 4, l = 3$

(C)  $n = 5, l = 0$  (D)  $n = 5, l = 3, m = +1$

6. 原子序数为29的元素，其原子核外电子排布应是 (C)

(A)  $[\text{Ar}]3d^94s^2$  (B)  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^2$

(C)  $[\text{Ar}]3d^{10}4s^1$  (D)  $[\text{Kr}]4d^{10}5s^1$

7. 下列量子数中, 合理的是 (D)

(A) 3, 0, 1, -1/2      (B) 2, 2, 0, +1/2

(C) 4, 3, -4, -1/2      (D) 5, 2, 2, +1/2

8. 下列原子中, 第一电离能最小的是 (C)

(A) B      (B) C      (C) Al      (D) Si

9. 下列各种原子序数的元素中, 其原子最外层电子数最多的是 (B)

(A) 2      (B) 15      (C) 38      (D) 42

10. 下列原子半径的大小, 正确的是 (A)

(A)  $r_{\text{Ga}} > r_{\text{Ge}}$       (B)  $r_{\text{Zn}} < r_{\text{Fe}}$

(C)  $r_{\text{Y}} > r_{\text{La}}$       (D)  $r_{\text{Sb}} > r_{\text{Bi}}$

11. 一般所说的Be原子半径是指 (D)

(A) 气态Be原子的半径

(B) 气态Be<sub>2</sub>分子中Be原子的半径

(C) BeO中Be原子的半径

(D) 金属Be晶体中Be原子的半径

12. 下列分(离)子中，无孤对电子的是 (C)

(A) H<sub>2</sub>O (B) H<sub>2</sub>S (C) NH<sub>4</sub><sup>+</sup> (D) PCl<sub>3</sub>

13. 某金属离子形成配合物时，在八面体弱场中，磁矩为4.98B.M.，而在八面体强场中，磁矩为零，该金属可能为 (D)

(A) Cr(III) (B) Mn(II)

(C) Mn(III) (D) Fe(II)

14. IB族元素的原子半径比相应的VIII族元素的原子半径大，原因是 (C)

- (A) d电子越多，半径越大
- (B) IB族的金属性比VIII族的强
- (C) 最外层电子受屏蔽效应大
- (D) 测定的实验方法不同

15. 对于第一、二周期元素所组成的多数同核双原子分子 (除F<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>外)，其分子轨道能级高低比较不正确的是 (B)

- (A)  $\sigma_{2s} < \sigma_{2s}^*$
- (B)  $\sigma_{2px} < \pi_{2py}$
- (C)  $\pi_{2py} = \pi_{2pz}$
- (D)  $\pi_{2py} < \sigma_{2px}^*$

16.  $\text{OF}_2$ 分子中，中心原子O周围的孤对电子对数目为 (C)

(A) 0 (B) 1 (C) 2 (D) 3

17. 下列分子中，表现为顺磁性的是 (B)

(A)  $\text{F}_2$  (B)  $\text{O}_2$  (C)  $\text{N}_2$  (D)  $\text{C}_2$

18. 既有离子键又有共价键的是 (D)

(A)  $\text{KCl}$  (B)  $\text{CO}$  (C)  $\text{NH}_4^+$  (D)  $\text{Na}_2\text{SO}_4$

19.  $\text{B}_2$ 的最低未占分子轨道 (LUMO) 是 (B)

(A)  $\pi_{2p}$  (B)  $\sigma_{2p}$  (C)  $\pi_{2p}^*$  (D)  $\sigma_{2p}^*$

20. 下列化合物中，既存在离子键和共价键，又存在配位键的是 (A)



21. 下列说法中正确的是 (D)

(A)  $\text{BCl}_3$ 分子中B-Cl键都是非极性的；

(B)  $\text{BCl}_3$ 是极性分子，B-Cl键是非极性的；

(C)  $\text{BCl}_3$ 是极性分子，B-Cl键都是极性的；

(D)  $\text{BCl}_3$ 是非极性分子，B-Cl键是极性的；

22. 下列分子中键级等于零的是 (B)



23.  $\text{H}_2\text{O}$ 分子的空间构型、中心原子的杂化方式分别为 (D)

(A) 直线形,  $\text{sp}$ 杂化 (B) V形,  $\text{sp}^2$ 杂化

(C) 直线形,  $\text{sp}^3\text{d}$ 杂化 (D) V形,  $\text{sp}^3$ 杂化

24.  $\text{PCl}_3$ 分子中, P采用的轨道是 (B)

(A)  $p_x$ 、 $p_y$ 和 $p_z$ 轨道 (B) 三个 $\text{sp}^3$ 杂化轨道

(C) 二个 $\text{sp}$ 杂化轨道与一个p轨道

(D) 三个 $\text{sp}^2$ 杂化轨道

25. 氧气分子具有顺磁性, 可用哪种化学键理论解释 (A)

(A) 分子轨道理论 (B) 杂化轨道理论

(C) 价层电子对互斥理论 (D) 现代价键理论

26. 14种晶格中不存在 (C)

- (A) 面心立方 (B) 体心正交  
(C) 面心四方 (D) 底心单斜

27. 已知物质有两种或两种以上的晶体结构，这种现象称为 (B)

- (A) 同晶现象 (B) 多晶现象  
(C) 同构现象 (D) 异构现象

28. 下列离子中，何者极化率最大 (B)

- (A)  $\text{Na}^+$  (B)  $\text{I}^-$  (C)  $\text{Rb}^+$  (D)  $\text{Cl}^-$

29. 下列哪种稀有气体沸点最低 (A)

- (A) He (B) Rn (C) Ar (D) Xe

30. 下列晶格能大小顺序中正确的是 (D)



31. 下列反应热可代表KCl晶格能的是 (A)



32. 都能形成氢键的一组分子是 (C)



33. 下列分子中, 偶极矩等于零的是 (A)



34. 下列固态的物质中, 熔化时需要破坏共价键的是 (A)



35. 一种离子应具有下列哪一种特征，它的极化能力最强 (B)

- (A) 离子电荷高，离子半径大
- (B) 离子电荷高，离子半径小
- (C) 离子电荷低，离子半径小
- (D) 离子电荷低，离子半径大

36. 下列物质中，共价成分最大的是 (D)

- (A)  $\text{AlF}_3$
- (B)  $\text{FeCl}_3$
- (C)  $\text{FeCl}_2$
- (D)  $\text{SnCl}_4$

37. 在配离子 $[\text{Co}(\text{en})(\text{C}_2\text{O}_4)_2]^-$ 中，中心原子的配位数是 (D)

- (A) 3
- (B) 4
- (C) 5
- (D) 6

38. 下列说法哪个总是正确的 (A)

- (A) 色散力存在所有分子之间
- (B) 在所有含氢化合物中存在氢键
- (C) 硅酸盐都是巨分子结构
- (D) 金属氧化物都是绝缘体

39. 下列关于 $[\text{Cu}(\text{CN})_4]^{3-}$ 的空间构型及中心离子的杂化方式的叙述中正确的是 (C)

- (A) 平面正方形,  $d^2sp^2$ 杂化
- (B) 变形四面体,  $sp^3d$ 杂化
- (C) 正四面体,  $sp^3$ 杂化
- (D) 平面正方形,  $sp^3d^2$ 杂化

40. M为中心原子，a、b、d为单齿配体。下列各配合物中有顺反异构体的是 (A)

(A)  $Ma_2bd$  (平面四方) (B)  $Ma_3b$

(C)  $Ma_2bd$  (四面体) (D)  $Ma_2b$  (平面三角形)

41. 根据晶体场理论，在一个八面体强场中，中心离子d电子数为多少时，晶体场稳定化能最大。 (B)

(A) 9 (B) 6 (C) 5 (D) 3

42. 下列配体中不能作多齿配体的是 (B)

(A)  $PO_4^{3-}$  (B)  $NH_3$  (C)  $CO_3^{2-}$  (D) 乙二胺

43. 下列物质的颜色不是d-d跃迁产生的 (C)

(A)  $Ni^{2+}$  (B)  $Cu^{2+}$  (C)  $MnO_4^-$  (D)  $Co^{2+}$

44. 下列配位数与其它三种不同的是 (B)



45. 下列离子生成配合物能力最弱的是 (D)



46. 下列离子形成的配合物一定具有顺磁性的是 (A)



47. 下列各配合物中, 有顺磁性的是 (C)



## 二、填空题

1. 实际气体与理想气体产生偏差的主要原因是：

① 分子间作用力 的影响； ② 分子体积 的影响。

2. 在标准状态下，气体A的密度为0.09g/L，B为1.43g/L，气体A对气体B的相对扩散速率为

4:1。

3. 在氢原子的激发态中，4s 和 3d 状态的能量高低次序为  $E_{4s} > E_{3d}$ ；对于钾原子，能量高低次序为  $E_{4s} < E_{3d}$ ；对于钛原子，能量高低次序为  $E_{4s} > E_{3d}$ 。

4. 基态氢原子的1s电子在距核53pm附近的球壳中出现的几率最大，这是因为距核较近时，几率密度虽大，球壳体积却较小，因而几率较小；距核较远时，球壳体积虽较大，几率密度却很小，因而几率也较小。

5. 在某一周期，其稀有气体最外电子层构型为 $4s^24p^6$ ，其中有A、B、C、D四种元素，已知它们的最外层电子数分别为2、2、1、7，A和C的次外层电子数为8，B和D的次外层电子数为18，则A Ca B Zn C K D Br

6. Z=46的元素的电子构型为  $[\text{Kr}]4d^{10}$  ,  
其元素名称为  $\text{Pd}$  。

7. 在元素周期表中, 按外电子构型可以将它们分为 s区、p区、d区、ds区、f区 五个区域, 其各区的价电子通式为:  $ns^{1-2}$ 、 $ns^2np^{1-6}$ 、 $(n-1)d^{1-9}ns^{1-2}$ 、 $(n-1)d^{10}ns^1$ 或  
 $(n-1)d^{10}ns^2$ 、 $(n-2)f^{0-14}(n-1)d^{0-2}ns^2$  。

8. 根据价层电子对互斥理论可推知 $\text{ICl}_4^-$ 共有 6 对价层电子对, 离子的空间构型为 平面四方, 中心原子采用的杂化方式为  $sp^3d^2$  。

9. 价层电子对互斥理论认为，分子或离子的空间构型取决于中心原子周围的价层电子对数，价层电子对指  $\sigma$  键电子对与 孤对 电子对。

10.  $\text{CO}_2$ 、 $\text{SiO}_2$ 、 $\text{MgO}$ 、 $\text{Ca}$ 的晶体类型分别是 分子晶体、原子晶体、离子晶体、金属晶体，其中熔点最高的是  $\text{MgO}$ ，熔点最低的是  $\text{CO}_2$ 。

11. 形成配位键具有两个条件：一是提供共用电子对的原子有 孤对电子，二是接受共用电子对的原子有 空轨道。

12. 在配离子 $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ 中，配位原子是N， $\text{NH}_3$ 是配体；在配离子 $[\text{Cu}(\text{en})_2]^{2+}$ 中，配位原子是N，乙二胺是配体。

13. 在碱金属的氢氧化物中，在水中溶解度最小的是LiOH；在银的卤化物( $\text{AgX}$ ,  $\text{X}=\text{F}$ 、 $\text{Cl}$ 、 $\text{Br}$ 、 $\text{I}$ )中，在水中溶解度最小的是AgI。

14. 若不考虑电子的成对能， $[\text{Co}(\text{CN})_6]^{4-}$ 的晶体场稳定化能为-18  $\text{Dq}$ ， $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ 的晶体场稳定化能为-8  $\text{Dq}$ 。

### 三、判断题

1. 当温度升高时，理想气体分子的速率分布曲线变宽变高。 (✘)
2. 当温度一定时，液体的饱和蒸气压与外压无关，为一定值。 (✓)
3.  $\text{H}_2\text{O}$ 分子中O原子采用的是 $\text{sp}^3$ 杂化， $\text{NH}_3$ 分子中N原子也采用了 $\text{sp}^3$ 杂化。 (✓)
4. 相同原子间形成的叁键键能的大小，可以通过这两个原子间形成的单键键能大小的3倍来计算。 (✘)

5.  $\text{NO}_2$ -分子，由于N原子采用了不等性 $\text{sp}^2$ 杂化，因此使得N-O键之间的夹角大于 $120^\circ$ 。 ( x )

6. 按照晶胞参数的差异将晶体分成七大晶系，按照带心的型式七大晶系可以分为14种布拉维格子。 ( ✓ )

7. 在Si中掺入一些P，构成p型半导体。 ( x )

8. 核外电子完全遵循构造原理进行排布，总是先排1s，再排2s，然后排2p，3s，3p，4s，3d，4p.....。 ( x )

9.元素原子序数增加时，原子的有效核电荷呈线性关系依次增加。 (✘)

10. 同一族从上到下，有效核电荷增加不多，原子半径增大很多，核对外层电子引力依次减弱，电子易于失去，电离能依次减小。 (✓)

## 四、计算题

1. 试用杂化轨道理论说明 $\text{SO}_2$ 、 $\text{CS}_2$ 分子中：  
①中心原子的杂化类型；②成键情况；③分子的空间构型；④分子有无极性。

$\text{SO}_2$ : ①  $\text{sp}^2$ 杂化；② 1对孤电子对，2个 $\sigma$ 键，1个 $\pi_3^4$ 键；③ V型；④ 极性分子。

$\text{CS}_2$ : ①  $\text{sp}$ 杂化；② 2个 $\sigma$ 键，2个 $\pi_3^4$ 键；③ 直线型；④ 非极性分子。

2. 指出下列配离子：①中心离子形成配离子前的价电子排布情况；②中心离子采取的杂化类型；③配合物的类型(外轨型还是内轨型)；④配合物的空间构型；⑤配合物在水中的相对稳定性大小。

(1)  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ ，磁矩 $\mu=3.8$ ；

(2)  $\text{Fe}(\text{CO})_5$ ，磁矩 $\mu=0$ 。

$$\mu = \sqrt{n(n+2)} = 3.8$$

$$n = 2.9 \approx 3$$