

類 科：化學工程

科 目：物理化學（包括化工熱力學）

考試時間：2 小時

座號：_____

※注意：(一)可以使用電子計算器。

(二)不必抄題，作答時請將試題題號及答案依照順序寫在試卷上，於本試題上作答者，不予計分。

一、當單原子理想氣體溫度經由下列兩種過程從 300 K 升高至 700 K，氣體的熵 (entropy) 變化各為何？

(一)定體積 (5 分)

(二)定壓 (5 分)

二、估計碳酸鋇 $\text{SrCO}_3(\text{s})$ 分解溫度，假設分解時平衡常數為 1。(15 分)

| | $\text{SrO}(\text{s})$ | $\text{CO}_2(\text{g})$ | $\text{SrCO}_3(\text{s})$ |
|--|------------------------|-------------------------|---------------------------|
| $\Delta_f H^0 / \text{kJ Mol}^{-1}$ | -592.0 | -393.52 | -1220.1 |
| $\Delta_f S^0 / \text{J K}^{-1} \text{Mol}^{-1}$ | 54.4 | 213.79 | 92.1 |

三、苯 (benzene) 與 1,3,5-三甲苯 (mesitylene, 1,3,5-trimethylbenzene) 溶液：

(一)討論此溶液為理想溶液或非理想溶液。(2 分)

(二)推導適用於此類溶液的混合熵 (entropy of mixing) ($\Delta_{\text{mix}} S$) 方程式。(6 分)

(三)以何種比例混合可以得到最大的混合熵 (entropy of mixing)，請分別以：

1. 莫爾分率 (mole fraction) 表示。(3 分)

2. 質量比 (mass ratio) 表示。(4 分)

四、利用反應機制 (reaction mechanism) 推導反應速率時，請舉出兩種常用的近似法，解釋並舉例說明。(10 分)

五、菌落 (bacterial colony) 成長可以一級 (first-order) 過程描述，細胞分裂依時間線性變化

$$\frac{dN}{N} = \eta dt,$$

上式中， dN 是在時間區間 dt 分裂的細胞數目，而 η 是常數。

(一)在時間 t 時菌落中之細胞數目為何？假設初始時間是 0，初始數目是 N_0 。(5 分)(二)定義細胞數目倍增 (即 $N'/N=2$) 的時間為世代時程 t_{gn} ，求世代時程 t_{gn} 。(3 分)(三)已知嗜乳酸桿菌在 30°C 牛奶中世代時程 t_{gn} 是 75 分鐘。在維持恆溫 30°C 牛奶放入一有 N_0 個細胞之嗜乳酸桿菌菌落 15、30、45、60、90、120 與 150 分鐘之後細菌數目各為多少？請對濃度函數與時間做一線性圖表示。(10 分)

六、決定下列分子之基態 (ground state) 對稱性點群 (point group) 與項徵 (term symbol)：

(一)乙烯 (ethene) C_2H_4 (6 分)(二)丙二烯 (allene) C_3H_4 (6 分)(三)萘 (naphthalene) C_{10}H_8 (6 分)

(請接背面)

類 科：化學工程

科 目：物理化學（包括化工熱力學）

- 七、使用原子軌域線性組合之分子軌域理論 (LCAO-MO) 和混成 (hybridization) 概念討論碳酸根 (CO_3^{2-}) 的鍵結。請將原子核置於 xy -平面上，回答下列小題：
- (一) 是否存在任何核心電子？若有是那些？總共幾個？(2分)
 - (二) 混成概念可用於描述 σ 鍵。 σ 鍵使用那些混成軌域？總共有幾個 σ 鍵？(4分)
 - (三) 使用路易士八隅體結構 (Lewis structure) 圖決定 σ 鍵和孤對電子 (lone pair electrons) 的數目。(4分)
 - (四) 這四個原子有那些軌域可形成 π 鍵？總共有幾個 π 軌域？其中有幾個 π 軌域在基態時有電子？(3分)
 - (五) 畫最低能量的 π 軌域的定性圖。(1分)