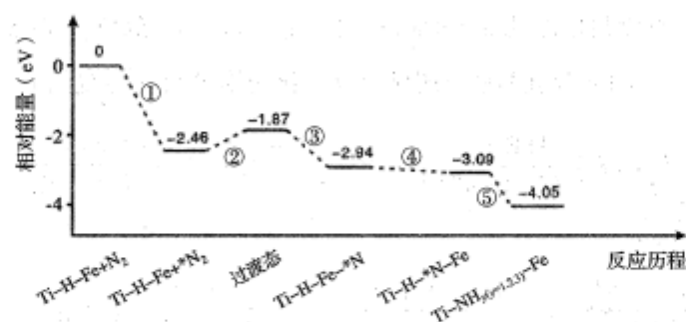


专题：反应机理经典考题

1. 【2020 年山东省普通高中学业水平等级考试（模拟卷）】

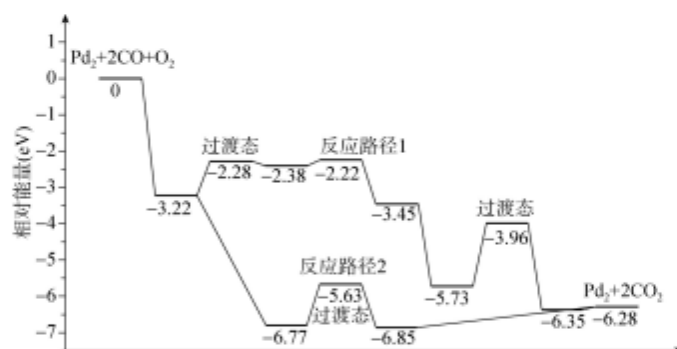
热催化合成氨面临的两难问题是：采用高温增大反应速率的同时会因平衡限制导致 NH_3 产率降低。我国科研人员研制了 Ti-H-Fe 双温区催化剂(Ti-H 区域和 Fe 区域温度差可超过 100°C)。Ti-H-Fe 双温区催化合成氨的反应历程如图所示，其中吸附在催化剂表面上的物种用*标注。下列说法正确的是



- A. ①为 $\text{N}\equiv\text{N}$ 的断裂过程
 B. ①②③在高温区发生，④⑤在低温区发生
 C. ④为 N 原子由 Fe 区域向 Ti-H 区域的传递过程
 D. 使用 Ti-H-Fe 双温区催化剂使合成氨反应转变为吸热反应

【答案】BC

2. 【百师联盟 2020 届高三期中联考全国卷，13】研究发现 Pd_2 团簇可催化 CO 的氧化，在催化过程中路径不同可能生成不同的过渡态和中间产物（过渡态已标出），下图为路径 1 和路径 2 催化的能量变化。下列说法错误的是



- A. CO 的催化氧化反应为 $2\text{CO} + \text{O}_2 = 2\text{CO}_2$
 B. 反应路径 1 的催化效果更好
 C. 路径 1 和路径 2 第一步能量变化都为 3.22 eV
 D. 路径 1 中最大能垒（活化能） $E_a = 1.77 \text{ eV}$

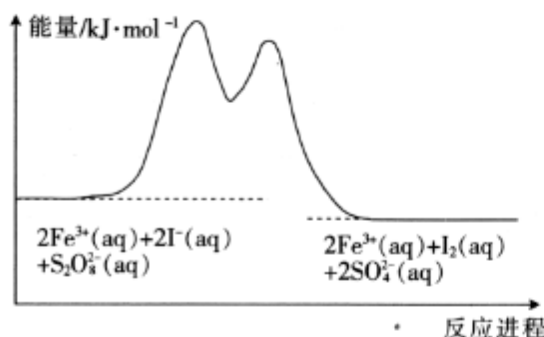
【答案】B

3. 【2019-2020 罗田县第一中学高三年級阶段测试卷，11】在含 Fe^{3+} 的 $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ 和 I^- 的混合溶液中，反应 $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}(\text{aq}) + 2\text{I}^-(\text{aq}) = 2\text{SO}_4^{2-}(\text{aq}) + \text{I}_2(\text{aq})$ 的分解机理及反应进程中的能量变化如下：

步骤①： $2\text{Fe}^{3+}(\text{aq}) + 2\text{I}^-(\text{aq}) = \text{I}_2(\text{aq}) + 2\text{Fe}^{2+}(\text{aq})$

步骤②： $2\text{Fe}^{2+}(\text{aq}) + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}(\text{aq}) = 2\text{Fe}^{3+}(\text{aq}) + 2\text{SO}_4^{2-}(\text{aq})$

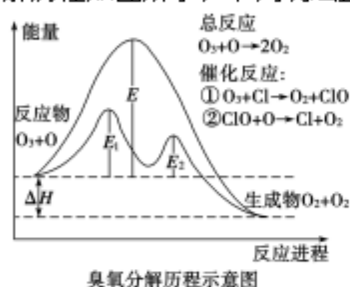
下列有关该反应的说法正确的是



- A. 化学反应速率与 Fe^{3+} 浓度的大小有关
 B. 该反应为吸热反应
 C. Fe^{2+} 是该反应的催化剂
 D. 若不加 Fe^{3+} , 则正反应的活化能比逆反应的大

【答案】A

4. 【2019·雅安一模】臭氧层中臭氧分解历程如图所示, 下列说法正确的是()

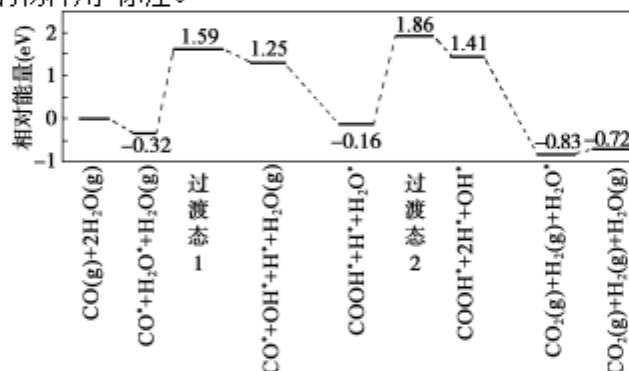


- A. 催化反应①、②均为放热反应
 B. 催化剂不能改变该反应的焓变
 C. ClO 是该反应的催化剂
 D. 在该反应过程中没有化学键的断裂与生成

【答案】B

5. 【2019·高考全国卷 I, 28(3)】

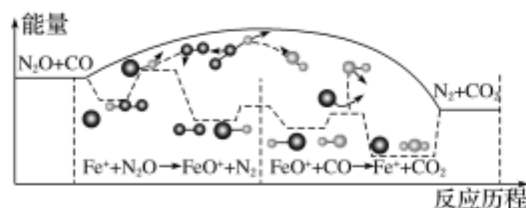
我国学者结合实验与计算机模拟结果, 研究了在金催化剂表面上水煤气变换的反应历程, 如图所示, 其中吸附在金催化剂表面上的物种用*标注。



可知水煤气变换的 ΔH _____ 0 (填“大于”“等于”或“小于”)。该历程中最大能垒(活化能) E_{max} = _____ eV, 写出该步骤的化学方程式: _____。

【答案】小于 2.02 $\text{COOH}^* + \text{H}^* + \text{H}_2\text{O}^* = \text{COOH}^* + 2\text{H}^* + \text{OH}^*$ (或 $\text{H}_2\text{O}^* = \text{H}^* + \text{OH}^*$)

6. 【2019·河南十校模拟】研究表明 N_2O 与 CO 在 Fe^+ 作用下发生反应的能量变化及反应历程如图所示, 下列说法错误的是()



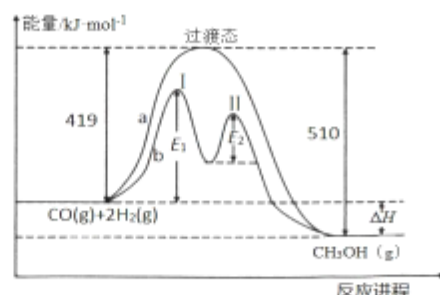
- A. 反应总过程 $\Delta H < 0$
 B. Fe^+ 使反应的活化能减小
 C. 总反应若在 2 L 的密闭容器中进行, 温度越高反应速率一定越快
 D. $\text{Fe}^+ + \text{N}_2\text{O} \longrightarrow \text{FeO}^+ + \text{N}_2$ 、 $\text{FeO}^+ + \text{CO} \longrightarrow \text{Fe}^+ + \text{CO}_2$ 两步反应均为放热反应

【答案】C

7. 【鄂东南省級示范高中教育教学改革联盟学校 2019 届第一次模拟】在反应 $\text{CO}(\text{g}) + 2\text{H}_2(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH}(\text{g})$ 中, 其两种反应过程中能量的变化曲线如右图

a、b 所示, 下列说法正确的是 ()

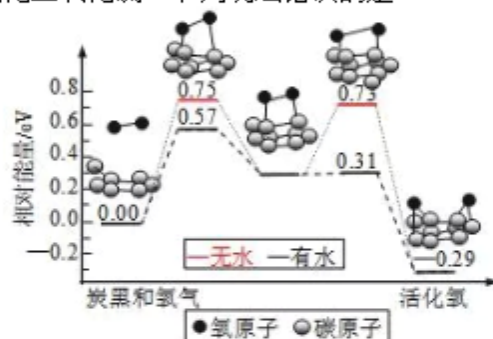
- A. 上述反应的 $\Delta H = -91\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
- B. a 反应正反应的活化能为 $510\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
- C. b 过程中第 I 阶段为吸热反应, 第 II 阶段为放热反应
- D. b 过程使用催化剂后降低了反应的活化能和 ΔH
- E. b 过程的反应速率: 第 II 阶段 > 第 I 阶段



【答案】: ACE

8. 【湖北省八校 2019 届高三 12 月第一次联考理综化学试题, 11】【2018 海南高考】

炭黑是雾霾中的重要颗粒物, 研究发现它可以活化氧分子, 生成活化氧, 活化过程的能量变化模拟计算结果如图所示, 活化氧可以快速氧化二氧化硫。下列说法错误的是



- A. 氧分子的活化包括 $\text{O}-\text{O}$ 键的断裂与 $\text{C}-\text{O}$ 键的生成
- B. 每活化一个氧分子放出 0.29eV 的能量
- C. 水可使氧分子活化反应的活化能降低 0.42eV
- D. 炭黑颗粒是大气中二氧化硫转化为三氧化硫的催化剂

【答案】C

9. 【2018·高考北京卷】我国科研人员提出了由 CO_2 和 CH_4 转化为高附加值产品 CH_3COOH 的催化反应历程。该历程示意图如图。

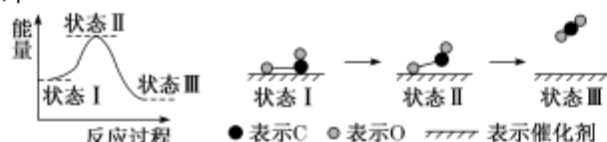


下列说法不正确的是 ()

- A. 生成 CH_3COOH 总反应的原子利用率为 100%
- B. $\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH}$ 过程中, 有 $\text{C}-\text{H}$ 键发生断裂
- C. ①→②放出能量并形成了 $\text{C}-\text{C}$ 键
- D. 该催化剂可有效提高反应物的平衡转化率

【答案】D

10. 【2015·北京卷】最新报道: 科学家首次用 X 射线激光技术观察到 CO 与 O 在催化剂表面形成化学键的过程。反应过程的示意图如下:

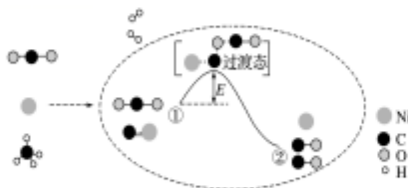


下列说法中正确的是()

- A. CO 和 O 生成 CO₂是吸热反应
B. 在该过程中, CO 断键形成 C 和 O
C. CO 和 O 形成了具有极性共价键的 CO₂
D. 状态 I → 状态 III 表示 CO 与 O₂反应的过程

【答案】C

11. 【2019·湖北部分重点中学联考】CO₂和 CH₄催化重整可制备合成气,对减缓燃料危机具有重要的意义,其反应历程示意图如下:

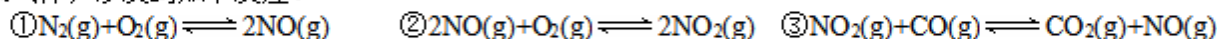


下列说法不正确的是()

- A. 合成气的主要成分为 CO 和 H₂
B. ①→②既有碳氧键的断裂,又有碳氧键的形成
C. ①→②吸收能量
D. Ni 在该反应中作催化剂

【答案】C

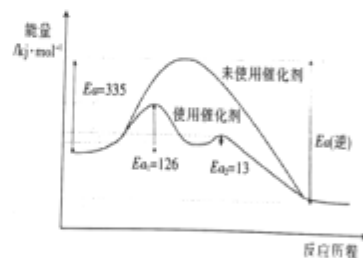
12. 【安徽省安庆市 2019 届高三下学期第二次模拟考试】汽车发动机工作时会产生包括 CO、NO_x 等多种污染气体,涉及到如下反应:



弄清上述反应的相关机理,对保护大气环境意义重大,回答下列问题:

(1)①请根据下表数据填空: $\text{N}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NO}(\text{g}) \quad \Delta H = \underline{\hspace{2cm}}$ 。(断开 1mol 物质中化学键所需要的能量)

物质	N ₂	O ₂	NO
能量(kJ)	946	497	811.25



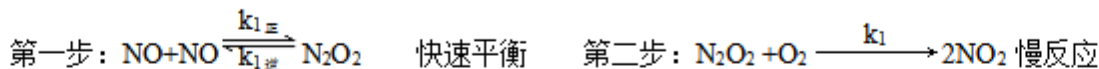
②该反应能量变化如上图所示,则未使用催化剂时,逆反应的活化能 $E_{a(\text{逆})} = \underline{\hspace{2cm}}$ kJ·mol⁻¹;使用催化剂之后正反应的总活化能为: $\underline{\hspace{2cm}}$ kJ·mol⁻¹。

(2)实验测得反应 $2\text{NO}(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) \rightleftharpoons 2\text{NO}_2(\text{g}) \quad \Delta H < 0$ 的即时反应速率满足以下关系式:

$$v_{\text{正}} = k_{\text{正}} \cdot c^2(\text{NO}) \cdot c(\text{O}_2); v_{\text{逆}} = k_{\text{逆}} \cdot c^2(\text{NO}_2), k_{\text{正}}、k_{\text{逆}} \text{ 为速率常数,受温度影响}$$

①温度为 T₁ 时,在 1L 的恒容密闭容器中,投入 0.6 mol NO 和 0.3 mol O₂ 达到平衡时 O₂ 为 0.2 mol;温度为 T₂ 时,该反应存在 $k_{\text{正}} = k_{\text{逆}}$,则 T₁ $\underline{\hspace{1cm}}$ T₂ (填“大于”、“小于”或“等于”)。

②研究发现该反应按如下步骤进行:



其中可近似认为第二步反应不影响第一步的平衡,第一步反应中: $v_{1\text{正}} = k_{1\text{正}} \times c^2(\text{NO})$; $v_{1\text{逆}} = k_{1\text{逆}} \times c(\text{N}_2\text{O}_2)$

下列叙述正确的是_____

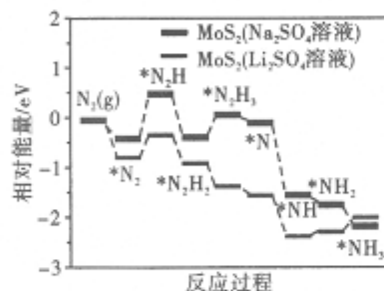
- A. 同一温度下,平衡时第一步反应的 $\frac{k_{1\text{正}}}{k_{1\text{逆}}}$ 越大反应正向程度越大
B. 第二步反应速率低,因而转化率也低
C. 第二步的活化能比第一步的活化能低
D. 整个反应的速率由第二步反应速率决定

【答案】(1)① -179.5 kJ/mol ② 514.5 126 (2)① 小于 ② AD

专题：反应机理经典考题 2

1. 【湖北八校 2020 届高三第一次联考理综】【福建省厦门市 2019 届高三毕业班 5 月第二次质量检查】

我国科学家以 MoS_2 为催化剂，在不同电解质溶液实现常温电催化合成氨，其反应历程与相对能量模拟计算结果如图。下列说法错误的是

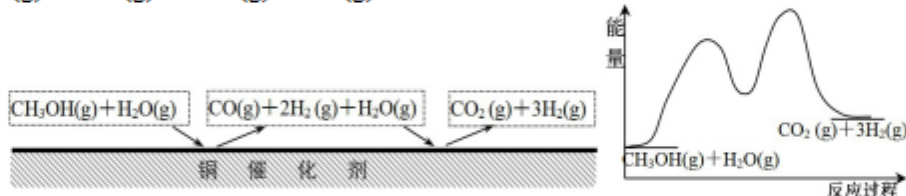
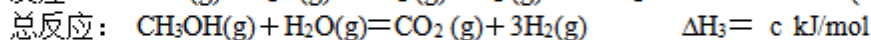
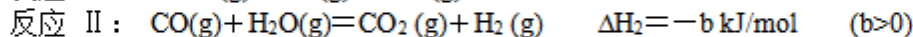
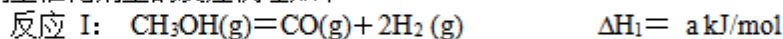


- A. Li_2SO_4 溶液利于 MoS_2 对 N_2 的活化
 B. 两种电解质溶液环境下从 $\text{N}_2 \rightarrow \text{NH}_3$ 的焓变不同
 C. $\text{MoS}_2(\text{Li}_2\text{SO}_4 \text{ 溶液})$ 将反应决速步 ($\text{N}_2 \rightarrow \text{N}_2\text{H}$) 的能量降低
 D. N_2 的活化是 $\text{N} \equiv \text{N}$ 键的断裂与 $\text{N}-\text{H}$ 键形成的过程

【答案】B

2. 【广深珠三校 2020 届高三第一次联考，10】

多相催化反应是在催化剂表面通过吸附、解吸过程进行的。如图，我国学者发现 $T^\circ\text{C}$ 时，甲醇 (CH_3OH) 在铜基催化剂上的反应机理如下：



下列有关说法中正确的是()

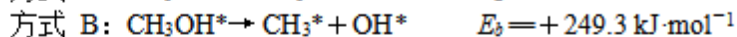
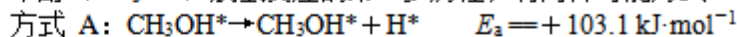
- A. 反应 I 是放热反应
 B. $1\text{mol CH}_3\text{OH}(\text{g})$ 和 $\text{H}_2\text{O}(\text{g})$ 的总能量大于 $1\text{mol CO}_2(\text{g})$ 和 $3\text{mol H}_2(\text{g})$ 的总能量
 C. $c > 0$
 D. 优良的催化剂降低了反应的活化能，并减少 ΔH_3 ，节约了能源。

【答案】C

3. 【广深珠三校 2020 届高三第一次联考，28 (3)】

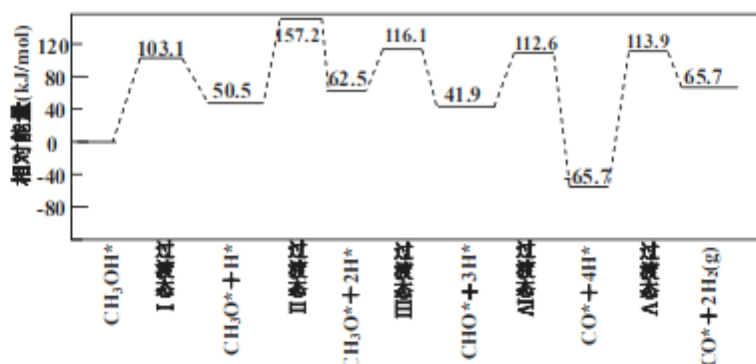
工业上可采用 $\text{CH}_3\text{OH} \xrightarrow[\Delta]{\text{催化剂}} \text{CO} + 2\text{H}_2$ 的方法来制取高纯度的 CO 和 H_2 。我国学者采用量子力学方法，通过计算机模拟，研究了在钨基催化剂表面上甲醇制氢的反应历程，其中吸附在钨催化剂表面上的物种用*标注。

甲醇 (CH_3OH) 脱氢反应的第一步历程，有两种可能方式：



由活化能 E 值推测，甲醇裂解过程主要历经的方式应为_____ (填 A、B)。

下图为计算机模拟的各步反应的能量变化示意图。

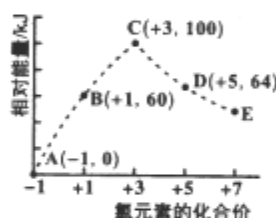


该历程中，放热最多的步骤的化学方程式为_____。

【答案】(3) A $\text{CHO}^* + 3\text{H}^* = \text{CO}^* + 4\text{H}^*$ (或 $\text{CHO}^* = \text{CO}^* + \text{H}^*$)

4. 【福建省龙岩市 2020 年高中毕业班教学质量检查】

一定条件下，在水溶液中 $1\text{ mol ClO}_x^- (x=0, 1, 2, 3, 4)$ 的能量(kJ)相对大小如图所示。下列有关说法错误的是



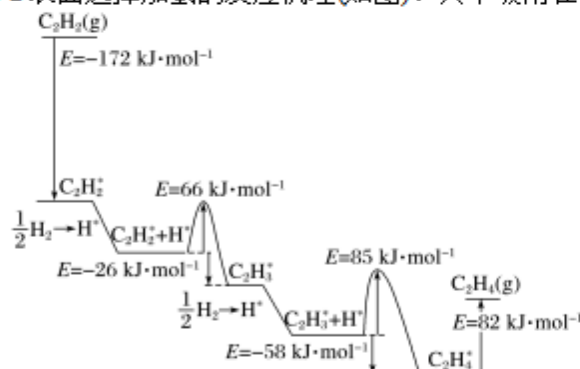
- A. 上述离子中结合 H 能力最强的是 E
 B. 上述离子中最稳定的是 A
 C. $\text{C} \rightarrow \text{B} + \text{D}$ 反应的热化学方程式为 $2\text{ClO}_2^-(\text{aq}) = \text{ClO}_3^-(\text{aq}) + \text{ClO}^-(\text{aq}) \quad \Delta H = -76\text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 D. $\text{B} \rightarrow \text{A} + \text{D}$ 的反应物的键能之和小于生成物的键能之和

【答案】A

5. 【河南省 2020 届高三上学期入学摸底考试】

乙炔、乙烯均是重要的化工原料。回答下列问题：

2010 年 Sheth 等得出乙炔在 Pd 表面选择加氢的反应机理(如图)。其中吸附在 Pd 表面上的物种用*标注。



上述吸附反应为_____ (填“放热”或“吸热”)反应，该历程中最大能垒(活化能)为_____ $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ，该步骤的化学方程式为_____。

【答案】放热 85 $\text{C}_2\text{H}_3^* + \text{H}^* \longrightarrow \text{C}_2\text{H}_4^*$

6. 【四川省攀枝花市 2019 届高三下学期第三次统考】

我国科学家使用双功能催化剂(能吸附不同粒子)催化水煤气变换反应: $\text{CO(g)} + \text{H}_2\text{O(g)} = \text{CO}_2\text{(g)} + \text{H}_2\text{(g)}$ $\Delta H < 0$, 在低温下获得高转化率与高反应速率。反应过程示意图如下:



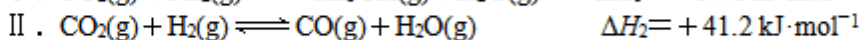
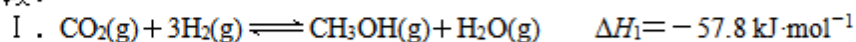
下列说法正确的是

- A. 图示显示: 起始时的 2 个 H_2O 最终都参与了反应
- B. 过程 I、过程 II 均为放热过程
- C. 过程 III 只生成了极性共价键
- D. 使用催化剂降低了水煤气变换反应的 ΔH

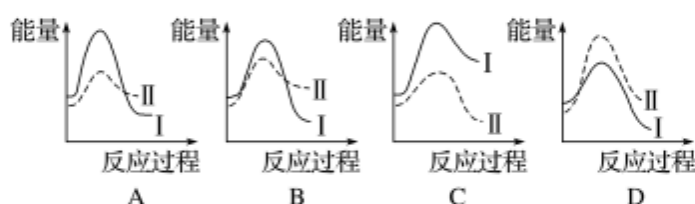
【答案】A

7. 【四川省成都市龙泉第二中学 2019 届高三化学 12 月月考试题, 27 (2)】

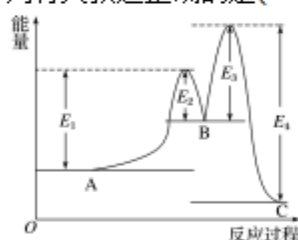
CO_2 在 Cu-ZnO 催化下, 可同时发生如下的反应 I、II, 其可作为解决温室效应及能源短缺问题的重要手段。



某温度时, 若反应 I 的速率 v_1 大于反应 II 的速率 v_2 , 则下列反应过程的能量变化正确的是_____ (填字母)。



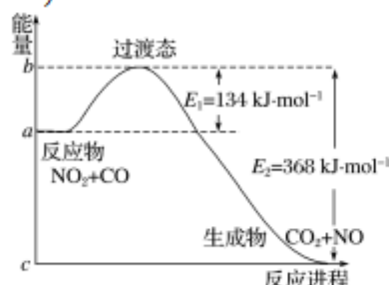
【答案】D

8. 【2020 年高考模拟卷 (浙江专用)】某反应由两步反应 $\text{A} \longrightarrow \text{B} \longrightarrow \text{C}$ 构成, 它的反应能量曲线如图所示(E_1 、 E_2 、 E_3 、 E_4 表示活化能)。下列有关叙述正确的是()

- A. 两步反应均为吸热反应
- B. 三种化合物中 C 最稳定
- C. 加入催化剂会改变反应的能量变化
- D. 整个反应中能量变化: $\Delta H = E_1 - E_4$

【答案】B

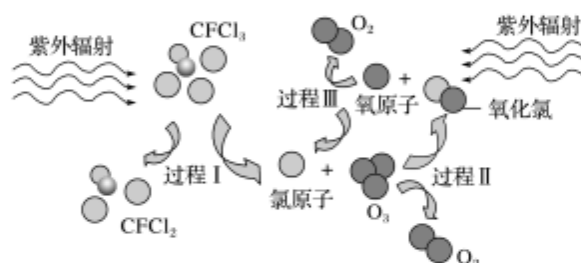
9. 【北京海淀区 2019 届高三五月模拟】可逆反应 $\text{NO}_2(\text{g}) + \text{CO}(\text{g}) \rightleftharpoons \text{CO}_2(\text{g}) + \text{NO}(\text{g})$ 反应过程中的能量变化如图所示, 下列说法正确的是()



- A. 1 mol NO_2 与 1 mol CO 混合经充分反应放热 234 kJ
 B. 若反应开始时加入催化剂, 则使 E_1 、 E_2 都变大
 C. 正反应的活化能是 $134 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 D. 该反应的反应热 $\Delta H = E_2 - E_1$

【答案】C

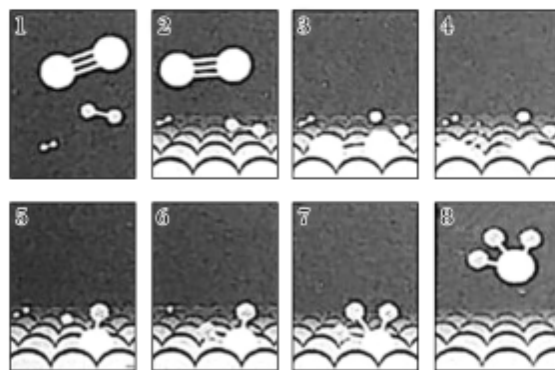
10. 【2020 高考人教版化学一轮复习】如图为氟利昂(如 CFCl_3)破坏臭氧层的反应过程示意图, 下列不正确的是()



- A. 过程 I 中断裂极性键 $\text{C}-\text{Cl}$ 键
 B. 过程 II 可表示为 $\text{O}_3 + \text{Cl} \rightarrow \text{ClO} + \text{O}_2$
 C. 过程 III 中 $\text{O} + \text{O} = \text{O}_2$ 是吸热过程
 D. 上述过程说明氟利昂中氯原子是破坏 O_3 的催化剂

【答案】C

11. 【北京市海淀区 2019 届高三适应性练习】固体表面的化学过程研究对于化学工业非常重要。在 Fe 催化剂、一定压强和温度下合成氨的反应机理如下图所示。下列说法不正确的是()



- A. N_2 和 H_2 分子被吸附在铁表面发生反应
 B. 吸附在铁表面的 N_2 断裂了 $\text{N} \equiv \text{N}$ 键
 C. NH_3 分子中的 $\text{N}-\text{H}$ 键不是同时形成的
 D. Fe 催化剂可以有效提高反应物的平衡转化率

【答案】D