

## 第一章 分子结构测定方法

### 一、填空题

- 1、刚性转体模型：
- 2、双原子分子转动光谱的选择定则
- 3、双原子分子转动能级公式
- 4、双原子分子振动能级公式
- 5、分子  $H_2, HCl, CO_2, H_2O, C_2H_6, CH_4, CH_3Cl, N_2$  中不显示红外吸收的分子是：

### 二、选择题

- 1、红外光谱(IR)由分子内部何种能量跃迁引起  
(A) 转动                      (B) 电子-振动  
(C) 振动                      (D) 振动-转动
- 2、用刚性转子模型处理双原子分子转动光谱，下列结论有错的是  
(A) 相邻转动能级差为  $2B(J+1)$   
(B) 相邻谱线距离为  $2B$   
(C) 第二条谱线频率为  $4B$   
(D) 最低转动能量为  $2B$
- 3、运用刚性转子模型处理异核双原子分子纯转动光谱，一般需知几条谱线位置  $\bar{\nu}(J)$  可计算其核间距  
(A) 5              (B) 2              (C) 3              (D) 4
- 4、已知一双原子分子的转动常数  $B$ (波数单位)，纯转动光谱中第三条谱线的波长为

(A)  $\frac{1}{4B}$       (B)  $\frac{3}{4}B$       (C)  $\frac{1}{6B}$       (D)  $\frac{B}{4}$

5、已测得两个同位素的转动光谱  $\bar{\nu}$  分别为  $a_1$  和  $a_2$ , 若已知  $\mu_1$ , 则  $\mu_2$  为

(A)  $(\frac{a_1}{a_2})^2 \mu_1$       (B)  $(\frac{a_2}{a_1})^{\frac{1}{2}} \mu_1$       (C)  $(\frac{a_2}{a_1}) \mu_1$       (D)  $(\frac{a_1}{a_2}) \mu_1$

6、HCN 分子的转动、振动自由度分子为

(A) 3, 6      (B) 5, 4      (C) 2, 4      (D) 2, 7

### 三、简答题

- 1、分子光谱的结构为什么比原子光谱复杂得多?
- 2、何谓分子的转动光谱, 振动光谱及电子光谱, 其频率在什么波段范围?
- 3、何谓双原子分子的刚性转子模型? 何谓转动光谱选律?
- 4、何谓双原子分子的谐振子模型? 何谓振动光谱选律?

### 四、计算题

- 1、已知 HI 的纯转动光谱每两条谱线间隔为  $13.10\text{cm}^{-1}$ , 试求其键长?
- 2、已知 CO 的键长为  $112.82\text{pm}$ , 试求  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  的纯转动光谱中相当于最前面的四种跃迁的谱线的波数。
- 3、已知卤化氢的振动光谱的基频分别为

$^1\text{H}^{19}\text{F}$	$4141.3\text{ cm}^{-1}$	$^1\text{H}^{35}\text{Cl}$	$2988.9\text{cm}^{-1}$
$^1\text{H}^{81}\text{Br}$	$2649.7\text{cm}^{-1}$	$^1\text{H}^{127}\text{I}$	$2309.5\text{cm}^{-1}$

试求它们的键的力常数和零点振动能。