

第二章 分子结构

一、 填空题

- 1、 C_2^+ 的分子轨道为_____，键级_____；
HCl 的分子轨道为_____，键级_____。
- 2、OF， OF^+ ， OF^- 三个分子中， 键级顺序为_____。
- 3、 HBr 分子基态价层轨道上的电子排布是_____。
- 4、对称元素 C_2 与 σ_h 组合，得到_____； C_n 次轴与垂直它的 C_2 组合，得到_____。
- 5、有一个 AB_3 分子，实验测得其偶极矩为零且有一个三重轴，则此分子所属点群是_____。
- 6、判别分子有无旋光性的标准是_____。
- 7、既具有偶极矩，又具有旋光性的分子必属于_____点群。

二、 选择题

- 1、 H_2^+ 的 $\hat{H} = \frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b} + \frac{1}{R}$ ， 此种形式已采用了下列哪几种

方法：

- | | |
|---------------|------------|
| (A) 波恩-奥本海默近似 | (B) 单电子近似 |
| (C) 原子单位制 | (D) 中心力场近似 |
- 2、对于"分子轨道"的定义，下列叙述中正确的是：
(A) 分子中电子在空间运动的波函数
(B) 分子中单个电子空间运动的波函数
(C) 分子中单电子完全波函数(包括空间运动和自旋运动)

(D) 原子轨道线性组合成的新轨道

3、含奇数个电子的分子或自由基在磁性上：

- (A) 一定是顺磁性 (B) 一定是反磁性
(C) 可为顺磁性或反磁性 (D) 没有磁性

4、下列分子的键长次序正确的是

- (A) $OF > OF > OF^+$ (B) $OF > OF^- > OF^+$
(C) $OF^+ > OF > OF^-$ (D) $OF^- > OF^+ > OF$

5、若以x轴为键轴，下列何种轨道能与 p_y 轨道最大重叠？

- (A) s (B) d_{xy} (C) p_z (D) d_{xz}

6、Cr 与 CO 形成羰基化合物 $Cr(CO)_6$ ，其分子点群为

- (A) D_{4h} (B) T_d (C) O_h (D) D_{6h}

7、2, 4, 6-三硝基苯酚是平面分子，存在离域 π 键，它是：

- (A) Π_{12}^{16} (B) Π_{14}^{18} (C) Π_{16}^{18} (D) Π_{16}^{16}

三、简答题

1、在有机化合物中， $C=O$ (羰基)的偶极距很大($\mu=7.67 \times 10^{-30} C \cdot m$)，而CO分子的偶极距却很小，解释原因。

2、 SO_4^{2-} 中S—O键长为 149? pm，比共价单键半径加和值(175? pm)短，说明原因。说明 SiF_6^{2-} 能稳定存在而 $SiCl_6^{2-}$ 不稳定的原因。

判断 NO 和 CO 哪一个的第一电离能小，原因是什么？

3、CO 是一个极性较小的分子还是极性较大的分子？其偶极矩的方向如何？为什么？

4、写出 N_2 基态时的价层电子组态，并解 N_2 的键长(109.8? pm)特别短、

键能($942 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$)特别大的原因。

5、已知 CO_2 ， CO 和丙酮中 C—O 键键长大小次序为：丙酮 $>$ CO_2 $>$ CO ，请说明理由。

四、计算题

- 1、用 HMO 法求烯丙基，烯丙基阳离子，烯丙基阴离子离域能及波函数。
- 2、用 HMO 法求环丙烯基的离域能及波函数。
- 3、应用HMO法近似确定 H_3^+ ， H_3 ， H_3^- 的最稳定构型是三角形还是直线型。