

第四章 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 μ_1 , 则 μ_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 13.10cm^{-1} , 试求其键长？
- 2、 已知CO的键长为 112.82pm , 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

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

试求它们的键的力常数和零点振动能。