

结构化学测试题1

班级_____ 学号_____ 姓名_____ 分数_____

一、判断正误

1. () 所谓分子轨道就是描述分子中一个电子运动的轨迹.
2. () 由于MO理论采用单电子近似, 所以在讨论某个电子 的运动时完全忽略了其它电子的作用.
3. () 所谓前线轨道是指最高占据轨道和最低空轨道.
4. () 杂化轨道是由不同原子的原子轨道线性组合而得到的.
5. () MO理论和VB理论都采用了变分处理过程.
6. () HF分子中最高占据轨道为非键轨道.
7. () 具有自旋未成对电子的分子是顺磁性分子, 所以只有含奇数 个电子的分子才能是顺磁性的.
8. () 用HMO方法处理, 含奇数个碳原子的直链共轭烯烃中必有一非键轨道.
9. () 分子图形的全部对称元素构成它所属的点群.
10. () 属 D_n 点群的分子肯定无旋光性.

二、选择正确答案

1. AB分子的一个成键轨道, $\psi = C_1\phi_A + C_2\phi_B$, 且 $C_1 > C_2$, 在此分子轨道中的电子将有较大的几率出现在()
a. A核附近 b. B核附近 c. A、B两核连线中点
2. 基态 H_2^+ 的电子密度最大处在()
a. H核附近 b. 两核连线中点 c. 离核无穷远处
3. σ 型分子轨道的特点是()
a. 能量最低 b. 其分布关于键轴呈圆柱形对称
c. 无节面 d. 由S型原子轨道组成
4. O_2^+ , O_2 , O_2^- 的键级顺序为()
a. $O_2^+ > O_2 > O_2^-$ b. $O_2^+ > O_2 < O_2^-$

- c. $O_2^+ < O_2 < O_2^-$ d. $O_2^+ < O_2 > O_2^-$
5. dz^2 与 dz^2 沿Z轴方向重叠可形成()分子轨道.
- a. σ b. π c. δ
6. 下列分子中哪些不存在大 π 键()
- a. $CH_2=CH-CH_2-CH=CH_2$ b. $CH_2=C=O$ c. $CO(NH_2)_2$ d. $C_6H_5CH=CHC_6H_5$
7. 属下列点群的分子哪些偶极矩不为零()
- a. T_d b. D_n c. D_{nh} d. $C_{\infty v}$

三、简要回答

1. MO理论中分子轨道是单电子波函数, 为什么一个分子轨道可以容纳2个电子?
2. 说明 B_2 分子是顺磁性还是反磁性分子, 为什么?
3. HMO理论基本要点.
4. 分子有无旋光性的对称性判据是什么?

5. BF_3 和 NF_3 的几何构型有何差异? 说明原因.

四、计算

1. 判断下列分子所属点群.

(1) CO_2 (2) SiH_4 (3) BCl_2F (4) NO (5) 1,3,5 -三氯苯 (6) 反式乙烷