

结构化学测试题1

班级_____ 学号_____ 姓名_____ 分数_____

一、判断正误

- () 所谓分子轨道就是描述分子中一个电子运动的轨迹.
- () 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.
- () 所谓前线轨道是指最高占据轨道和最低空轨道.
- () 杂化轨道是由不同原子的原子轨道线性组合而得到的.
- () MO理论和VB理论都采用了变分处理过程.
- () HF分子中最高占据轨道为非键轨道.
- () 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.
- () 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.
- () 分子图形的全部对称元素构成它所属的点群.
- () 属 D_n 点群的分子肯定无旋光性.

二、选择正确答案

- 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
- 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
- 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
- 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