

得分
24

一、单项选择题（共 15 题，每小题 2 分，共 30 分）

- 下列量子数中哪一组是正确的：(C) ✓
~~(A)~~ $n=3, l=-2, m=0$ ~~(B)~~ $n=4, l=1, m=-2$
 (C) $n=2, l=1, m=0$ ~~(D)~~ $n=3, l=3, m=-3$
- 以下原子的核外电子排布式错误的是：(B) ✓
 (A) Fe: $[\text{Ar}]3d^6 4s^2$ (B) Cu: $[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2$
 (C) B: $[\text{He}]2s^2 2p^1$ (D) Al: $[\text{Ne}]3s^2 3p^1$
- $\Psi_{3,2,0}$ 代表简并轨道中的一个轨道是：(C) ✓
 A. 2p 轨道 B. 3p 轨道
 C. 3d 轨道 D. 4f 轨道
- 3d 轨道的磁量子数可能是：(B) ✓
 (A) 1, 2, 3 (B) 0, $\pm 1, \pm 2$
 (C) 0, 1, 2 (D) 0, ± 1
- 下列分子中，以 sp^3 不等性杂化轨道成键的是：(C) ✓
 (A) BeCl_2 ~~(B)~~ BF_3 (C) PCl_3 ~~(D)~~ SiH_4
- 某分子中心原子 A 的价层电子对数 VPE 为 5，其分子的几何构型不可能的是：(B) ✓

- (A) 变形四面体 (B) 四方锥
(C) T形 (D) 三角双锥
7. 下列分子中，两个相邻共价键间的夹角最小的是：(C) ✓
- A. BF_3 B. CO_2
C. H_2O D. NH_3
8. 下列物质的离子极化作用最大的是：(C) ✗
- (A) MgF_2 (B) NaF
(C) AlF_3 (D) SiF_4
9. 以下属于正交晶系晶胞参数的是：(B) ✓
- (A) $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ (B) $a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
(C) $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ (D) $a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
10. 熔化下列晶体时，只需克服色散力的是：(B) ✓
- (A) HF (B) CO_2
(C) KF (D) NH_3
11. 在以下离子晶体中，阳离子与阴离子配位比是 8:8 的离子是：(A) ✗
- (A) NaCl (B) CsCl (C) ZnS (D) CaF_2
12. 在以下物质中，熔点最高的是：(C) ✓
- (A) K_2O (B) Na_2O
(C) MgO (D) CaO
13. 以下分子中含有氢键的是：(A) ✓
- (A) NH_3 (B) PH_3
(C) AsH_3 (D) SbH_3
14. 金属晶体面心立方密堆积结构原子配位数为：(D) ✓
- (A) 6 (B) 8 (C) 10 (D) 12
15. 以下配体按照光谱化学序列，所产生的晶体场分裂能最小的是：(A) ✗
- (A) CN^- (B) NH_3 (C) H_2O (D) I^-

得分

二、填空题（共 20 分，每空 1 分）

1. 28 号元素 Ni 的核外电子排布为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$ 该元素在

周期表中 四 周期 VIII 族 d 区。

2. 决定电子云形状的量子数为 磁量子数。

3. PH_3 分子中的 P 原子在成键时采取的杂化轨道类型是

sp^3 杂化，几何构型为 三角锥形。

4. 配合物 $K_3[Fe(CN)_6]$ 中形成体是 $[Fe(CN)_6]^{3-}$ ；配位原子是 C；配位数是

6。

5. 写出下列各原子电子构型代表的元素符号及名称。

(1) $[Ar]3d^5 4s^2$ Mn 锰

(2) $[Ne]3s^2 3p^2$ Si 硅

(3) $[Xe]4f^{14} 5d^{10} 6s^1$ Pt 铂

6. 金属晶体中粒子的排列方式按照 ABAB... 方式排列的密堆积方式为

六方最密堆积。

7. 描述离子本身变形性的物理量为 极化力。

8. 分子间的相互吸引作用包括色散作用，诱导作用和

取向作用。

9. 配合物命名： $Fe(CO)_5$ 五羰基铁， $H_2[PtCl_6]$ 六氯合铂酸，

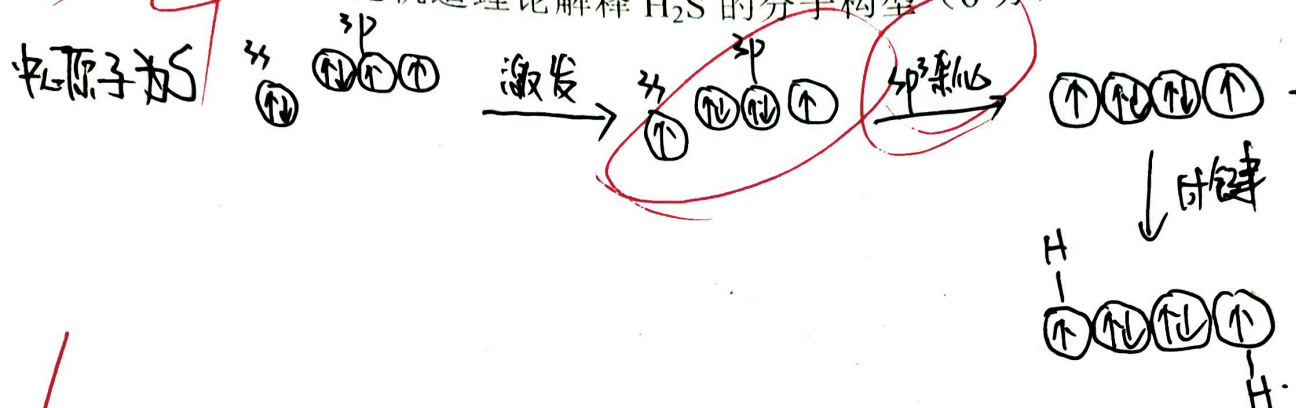
$[Cu(NH_3)_4](OH)_2$ 二羟基四氨合铜。

得分

23

三、简答题 (共 5 题, 共 30 分)

1. 用杂化轨道理论解释 H_2S 的分子构型 (6 分)



2. 由价层电子对互斥理论推测 IF_5 分子的空间构型 (6 分)

IF_5 分子 $VPN = \frac{1}{2} (7 + 5 \times 1) = 6$ $m = 5$ $\therefore n = 1$

$\therefore IF_5$ 分子的空间构型为 四方锥。

3. 指出稀有气体 He, Ne, Ar, Kr, Xe 熔沸点的高低顺序, 并从分子间力的角度解释其原因? (6 分)

He, Ne, Ar, Kr, Xe 均为单原子分子。

He, Ne, Ar, Kr, Xe 原子半径逐渐增大。
即分子间距离逐渐增大。所以分子间作用力不断减小。
所以熔沸点逐渐降低。

\therefore 熔沸点 $He > Ne > Ar > Kr > Xe$

4. 石墨具有良好的导电传热性，又常用作润滑剂，各与什么结构有关 (6分)

石墨中C原子为 sp^2 杂化，原子C形成3个 σ 键，剩余的2p电子在
与 sp^2 轨道垂直的平面上形成大 π 键，大 π 键中的电子可以自由移动，
使石墨具有良好的导电传热性。

石墨层与层之间靠分子间作用力结合，层与层之间距离较远，引力

较弱，层与层之间可以滑动，所以石墨常用作润滑剂

5. 指出下列各固态物质中分子间作用力的类型 (6分)

(1) CO_2 (2) HBr (3) H_2O

1) ~~范德华作用~~ 色散力

2) ~~色散作用~~ 色散力，诱导力，取向力

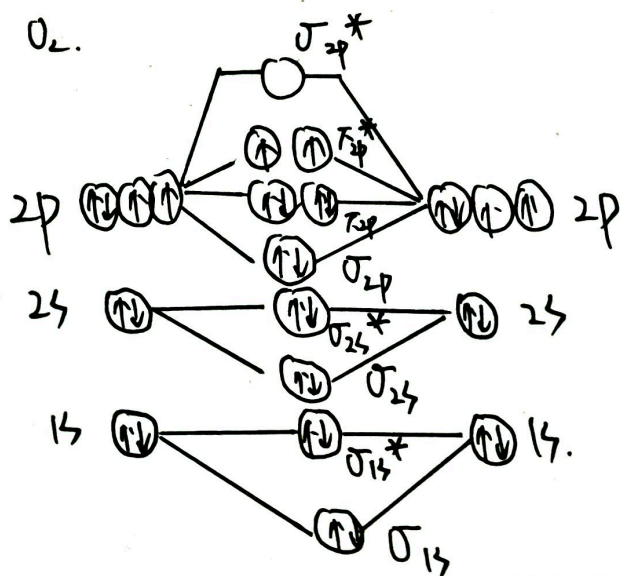
3) 色散力，诱导力，取向力，氢键

得分

13

四、问答题 (共2题，共20分)

1. 实验测得 O_2 的键长比 O_2^+ 的键长长，如何解释上述实验事实，
计算他们的键级，并画出 O_2 的分子轨道能级图。 (10分)



$$O_2 \text{ 的键级 } \frac{1}{2} (6 - 2) = 2$$

$$O_2^+ \text{ 的键级 } \frac{1}{2} (6 - 1) = \frac{5}{2}$$

\therefore 键级越大，吸引作用越强

又 $\because O_2^+$ 的键级比 O_2 的键级大

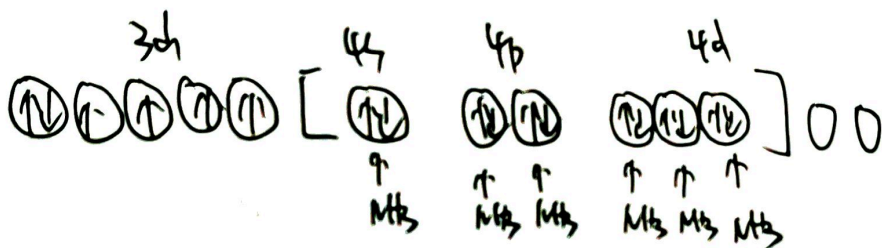
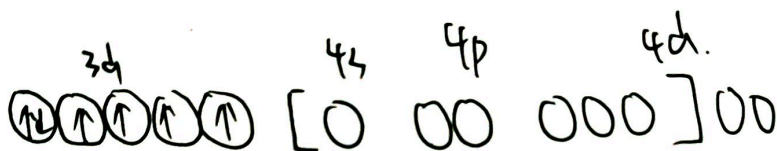
$\therefore O_2^+$ 的键长比 O_2 短

即 O_2 的键长比 O_2^+ 的键长长

2. 硼砂!

2. 已知 $[\text{Fe}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 的磁矩为 5.2 B.M., 试用价键理论和晶体场理论, 分别画出它形成时中心离子的价层电子分布, 并指出此配合物属于哪种类型 (内轨和外轨, 低自旋和高自旋)。(10 分)

价键理论 $\mu = 5.2 \text{ B.M.}$ $\mu = \sqrt{n(n+2)}$ $\therefore n = 4$

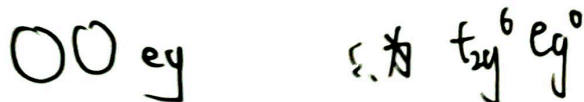


\therefore 采用 sp^3d^2 杂化, 为八面体构型。

晶体场理论

$[\text{Fe}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 中心原子为 Fe^{2+} $\therefore \text{NH}_3$ 为强场配体

\therefore 强场低自旋



\therefore 为低自旋, 内轨。

8. 离子极化率: 描述本身变形性的物理量

离子极化力: 描述一个离子对其他离子变形的影响能力.

极化率的一般规律: ① 离子半径 $r \uparrow \rightarrow$ 极化率 \uparrow

② 负离子极化率 $>$ 正离子

③ 正离子电荷越多, 负离子电荷越多 $\rightarrow \uparrow$

极化力的一般规律: ① $r \downarrow \rightarrow F \uparrow$

② 电荷 $\uparrow \rightarrow F \uparrow$

③ 离子电子层及电子构型

阴离子相同, 正电荷越多, 极化作用越强,

11. 离子晶体类型

① NaCl 型 配位数: 6:6

② CsCl 型 配位数: 8:8

③ ZnS 型 配位数为: 4:4

15. 晶体的晶格能大小.

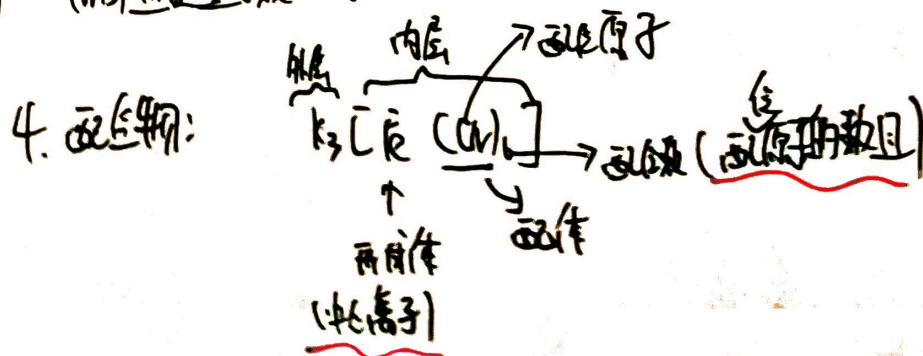
$I^- < Br^- < Cl^- \dots < H_2O < NH_3 < SO_3^{2-} < NO_2^- < CN^-, CO.$

2. (i) 主量子数: 决定轨道或电子能量.

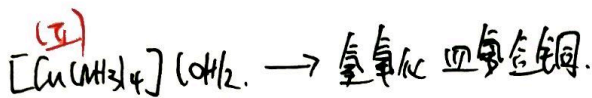
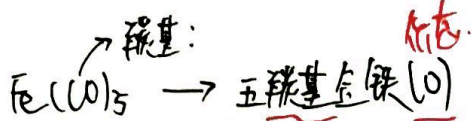
(ii) 角量子数: 决定电子空间运动的角动量, 以及原子轨道或电子云形状.

(iii) 磁量子数: 决定原子轨道或电子云的伸展方向.

(iv) 自旋量子数: 描述轨道的电子自旋.



9. 配合物命名.



~ 羟基合...

用杂化轨道理论解释 H_2S 分子构型.

中心原子为 S $3s^2 3p^4$



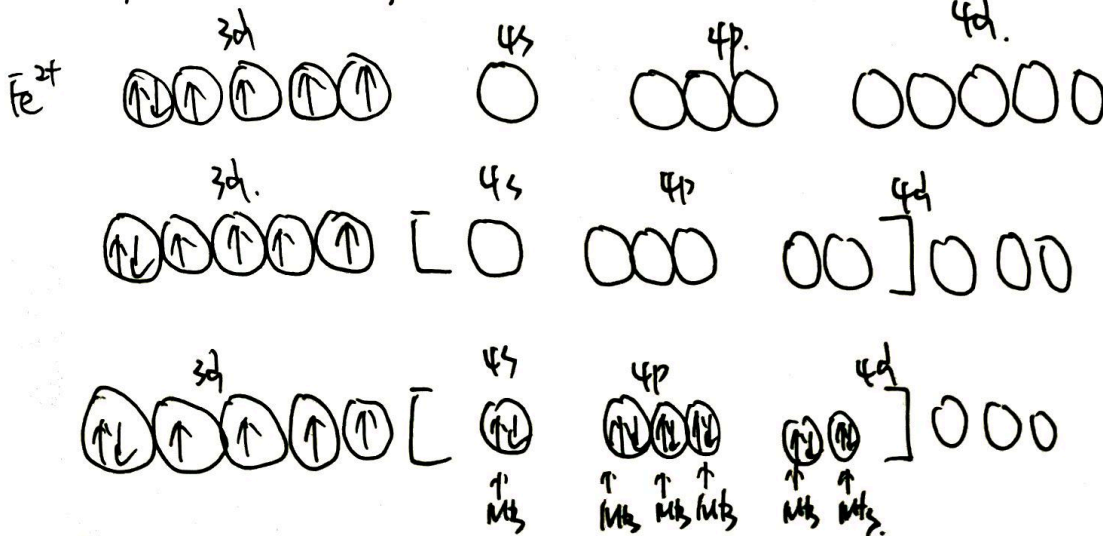
\therefore 为 V 形

3. 价键理论.

$\mu = 5.2 \text{ B.M.}$

$\mu = \sqrt{n(n+2)}$

$\therefore n = 4$



\therefore 为 sp^3d^2 杂化 为 外轨

晶体场理论

$\therefore n = 4$



\therefore 为高自旋配合物

中心离子为 Fe^{2+}

