《结构化学》期中考试

试卷分析

-化学专业

—. 选择题: (共40分) ムナム スト

(C) 10^9 m/s (D) 10^4 m/s

3.
$$H_2^+$$
 $\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_a} - \frac{1}{r_b} + \frac{1}{R}$

此种形式已采用下刻哪几种方法..... (<mark>A)波恩-奥本海默近似</mark> (B)单电子近似

(C)原子单位制

(D)中心力场近似

4. 对于氢原子的 $oldsymbol{arphi}_{2p_7}$ 轨道的电子云角度分布图 为相切于原点的两个球面,电子出现在这两个球面上 的任意一点的几率密度都相等,对吗?(错)



5. 用紫外光照射某双原子分子,使该分子电离出一个电子。如果电子电离后该分子的核间距变短了,则表明 该电子......<mark>.(C)</mark>

(A)从成键MO 上电离出去的。

(B)从非键MO 上电离出去的。

(C)从反键MO 上电离出去的。

(D)不能断定是从哪个轨道上电离出去的。

7. "空间同一点出现两个电子的概率一定为零",对

8.电子在核附近有非零概率密度的原子轨道是……<mark>.(D)</mark> (A) *[]3p* (B) *[]4d* (C) *[]2<mark>p* (D) *[]2S*</mark>

9. 通过变分法计算得到的微观体系的能量总是….(C) (A)等于真实基态能量; (B)大于真实基态能量; (C)不小于真实基态能量; (D)小于真实基态能量。

10. 已知He+处于 (311状态,则下列结论何者正确?....(D) (A) E= -1.51eV; -1か g (B) 简并度为1; (C) 径向分布函数的峰只有一个; (D)都不正确 カーレー・カートン

11. 谱项3D 的可能微观状态共有......(A)

12. 在
$$\hat{\mathbf{C}}$$
 2 $\hat{\mathbf{C}}$ 群中, $\hat{\mathbf{C}}_2$ 写 $\hat{\mathbf{C}}$ 的乘积为……

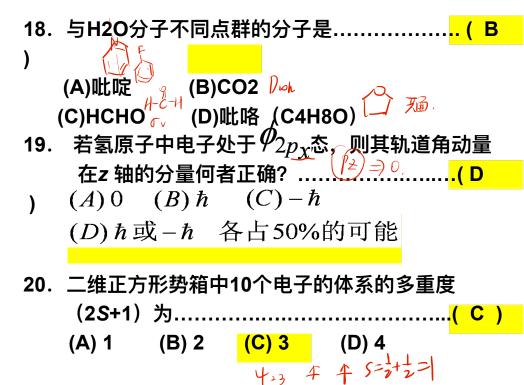
14. 根据保里原理,"巢电子波函数必须是反对称的。"对吗? (错

$$(A) E = h \frac{c}{\lambda} \qquad P = h \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

$$(B) E = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

$$(C) E = e(\frac{12.25}{\lambda})^2$$
 (D) A, B, C 都可以

(C)
$$\int_0^{\pi} \Theta^2 d\theta = 1$$
(B)
$$\int_0^{\infty} R^2 dr = 1$$
(C)
$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y^2 d\theta d\phi = 1$$
(D)
$$\int_0^{\pi} \Theta^2 \sin\theta d\theta = 1$$



1. 写出Na+离子中电子的薛定谔方程

动能算符 核-电子势能算符 电子-电子

 $\left[\sum_{i=1}^{10} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\right) - \sum_{i=1}^{10} \frac{11 e^2}{4\pi \varepsilon_0 r_i} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{10} \sum_{i\neq i} \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 r_{ii}}\right] \Psi = E \Psi$

2. 氧原子的谱项为<u>1D, 3P, 1S</u>, 基谱为<u>3P2</u>。

4. 物理量 $xp_y - yp_x$ 的量子力学算符在直角

坐标系中的表达式是 $\frac{\hbar x \frac{\partial}{\partial y} + i\hbar y \frac{\partial}{\partial x}}{\hbar x}$ 。

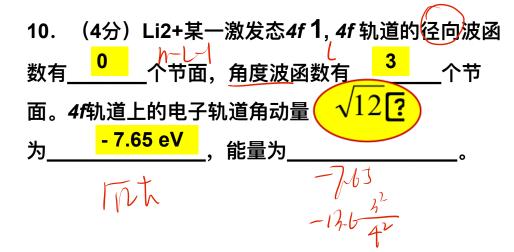
支项**3D2**所表征的状态 在外磁场作用下,该光谱支项 个微观状态。 体系电子的完全波函数可用Slater行列式表

示,Slater行列式的元<mark>自旋-轨道(或单电子完全波函数)</mark>

是<u>别处一块的人</u>。采用行列式形式, 自然会满足下述条件:当交换任何一对电子的包含自

放<mark>反对称的</mark> 完全波函数应该是_____。

9. d_{xy} 和 d_{xy} 轨道沿 x 和 z 轴作用分别能形成 \blacksquare 数型的分子轨道。



11. CO分子中电子组态为__(1[])2(2[])2(3[])2(4[])2(1[])4(5 键级为_3_, 化学键为_一个双电子σ键,两个双电子π键。

12. 二茂铁Fe(C5H5)2的结构经X-衍线测定,确认为 夹心式构型,两个Cp环为交错型,属_D5d_点群; 后用电子衍射法测定气态的Fe(C5H5)2 分子, 认为两 衍射,发现室温下两个Cp^h环即不是交错型,也不是 重叠型,但和重叠型比较接近,应属___**D5**___点

该分子容易被氧化为NO+的原因

[,]NO分子中有反键的π电子,活泼,易失去。

_。

15. 氢原子波函数 $\Psi_{2p_{\chi}}$ 是算符 \hat{H} , \hat{M}_{l}^{2} , \hat{M}_{lz} 中

 $\frac{\hat{H}$ 和 \hat{M}_I^2 的本征函数原因是

因为在 $\Psi_{2p_{\chi}}$ 描述的状态下

n和l有确定值,分别为2和1,体系的能量有确定值-3.4 eV,轨道角动量的平方有确定值 $2h^2$

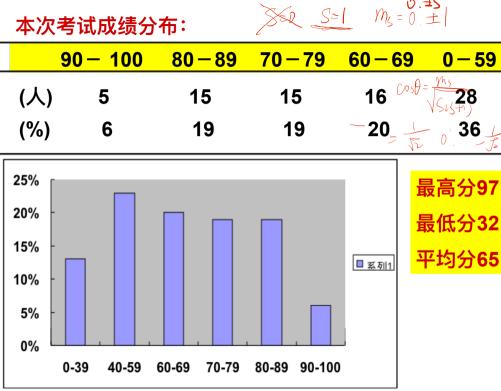
16. 氢原子的零点能约为__-13.6 eV__,基态氢原子单位体积中电子出现概率最大值在__核附近___处;单位厚度的球壳体积中出现概率最大值在__<u>离核a0</u>_处。

7. 设[]A和[]B(能量分别为EA和EB)分别是原子A 和B的轨道,两者线性组合形成成键分子轨道 *□*=c*A□*A+c*B□*B(假设c*A*和 c*B*都为正数),如果 **EA>EB**,则**cA < cB** 。如果该分子轨道上运动 的电子,在A原子的∏A原子轨道上出现的概率 为70%,在B原子的///B原子轨道上出现的概率 为30%,则该分 $\psi = 0.8367 \phi_{A} + 0.5477 \phi_{R}$ 子轨道波函数

在**0**—a/4区间出现的几率为 $\int_0^{\frac{a}{4}} \psi^2(x) dx = \int_0^{\frac{a}{4}} \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx$ (列出公式),该粒子的零点能为 $\frac{h^2}{8ma^2}$ 。

18. 在边长为a的一维势箱中的自由粒子处于状态时,

为<u>「大</u>, 与 z 轴的夹角的,**90°**, 135°



最高分97 最低分32

36

0 - 59

存在主要问题:

- (1)基本概念理解不透;
- (2) 多数同学没有重视本次考试;
- (3) 平时提问太少;
- (4) 本次试题难度适中,没有考好的学生要自己敲 敲警钟了!